



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»



13 – 15 ноября
Open Science²⁰²⁴



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

XI Всероссийского молодежного
научного форума
с международным участием
«Open Science 2024»



13–15 ноября 2024 г.
Гатчина

В данном выпуске представлены аннотации докладов XI Всероссийского молодежного научного форума с международным участием «Open Science 2024», 13-15 ноября 2024 года, г. Гатчина.

Проведению форума оказал поддержку



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»



Спонсором форума стал АО «Невский Проект».

Сборник подготовили: А.Н. Железова, С.С. Мохова, Н.В. Дмитриева,

Р.А. Ниязов

Обложка: Е.В. Калоева.

Примечание: материалы представлены в авторской редакции.

©НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2024

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели программного комитета:

Саранцева Светлана Владимировна, д.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Воронин Владимир Владимирович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Секретарь программного комитета:

Ниязов Рамиль Асхатович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Члены программного комитета:

Аристов Дмитрий Николаевич, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Артамонов Станислав Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Воробьев Сергей Иванович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Взнуздаев Марат Евгеньевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Григорьев Сергей Валентинович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Губанова Надежда Николаевна, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт»
Ким Виктор Тимофеевич, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Курбаков Александр Иванович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Ларин Сергей Владимирович НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Матвеев Максим Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Онегин Михаил Сергеевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Титов Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Шахова Вера Михайловна, канд. биол. наук, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Черненко Андрей Юрьевич, к.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Шабалин Константин Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Федин Олег Львович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Фридман Сергей Рувикович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Якорев Олег Петрович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Демин Вячеслав Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
Москалева Елизавета Юрьевна, д.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели организационного комитета:

Петрова Наталья Юрьевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Шека Светлана Александровна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Заместители председателей организационного комитета:

Абрамец Владислава Владимировна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Железова Алина Николаевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Секретарь организационного комитета:

Калоева Екатерина Витальевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Члены организационного комитета:

Буш Наталия Константиновна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Васильченко Ирина Борисовна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Дмитриева Надежда Васильевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Елисеева Алёна Дмитриевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Жеронкина Римма Александровна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Калоева Екатерина Витальевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Миндалев Павел Юрьевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Мохова София Сергеевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Плякина Екатерина Владимировна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Рябокоть Ирина Сергеевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Степанова Анастасия Александровна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Хадеева Полина Андреевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Ямов Даниил Алексеевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

СОДЕРЖАНИЕ

Пленарные доклады	5
Физика атомного ядра и частиц	7
Теоретическая физика.....	28
Физика конденсированного состояния	46
Физика и техника реакторов и ускорителей.....	61
Генетика, биомедицина, биофизика.....	69
Материаловедение и наноструктурированные материалы	105
Ядерная медицина.....	156

Пленарные доклады



А.Ф. Топунов¹, О.В. Космачевская¹, Л.Г. Ваганян²

E-mail: aftopunov@yandex.ru

¹Институт биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Распространенным является мнение, что в развитии науки физика обгоняла биологию. Покажем, что их развитие шло параллельно и часто одновременно.

Первые теории возникли в астрономии и медицине: геоцентрическая система мира (Эвдокс, 1-я пол. IV в. до н.э.) и «Гиппократов корпус» (после 430 до н.э.). Аристотель обобщил знания в обеих науках («Физика», 347-322 до н.э., «О частях животных», ~350 до н.э.; «История животных», ~330 до н.э.). Клавдий Птолемей подробно описывает геоцентрическую систему (~140 н.э.), Гален выполняет такую же работу по медицине (175 н.э.). Во время арабско-персидского периода сделаны работы, ставшие основой для дальнейшего развития науки: точный звездный каталог Улугбека (1444) и «Канона врачебной науки» Авиценны (1023).

Европа, 1543: «Об обращении небесных сфер» Коперника (гелиоцентрическая система) и «О строении человеческого тела» Везалия (начало научной анатомии). При этом Коперник сохранил центр Вселенной (им стало Солнце), его убрал Джордано Бруно (1584). У Везалия нет малого круга кровообращения, его описал Сервет (1553). Кеплер формулирует законы движения планет (1619-1627), Гарвей описывает сердечно-сосудистую систему с малым кругом (1628). Изучаются микрообъекты. Гассенди возрождает атомизм (1649); Гук описывает клетки (1665), Левенгук — микроорганизмы (1676). Конец XVII — начало XVIII вв. — вершины классической науки: «Математические начала натуральной философии» Ньютона (1687) и «Система природы» Линнея (1735). Природа вечна и неизменна.

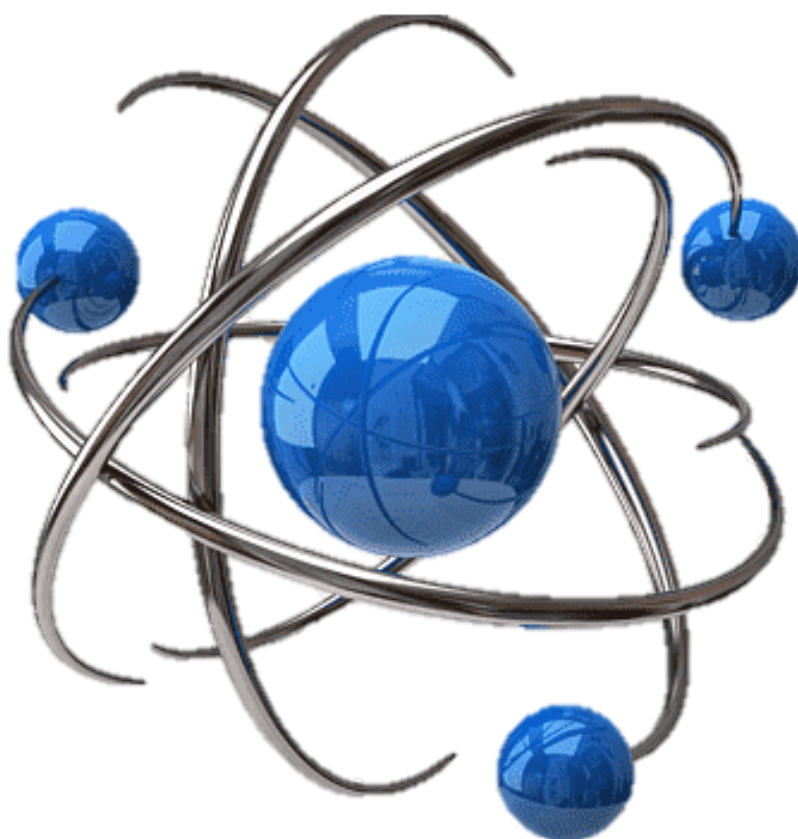
В начале XIX в. уже обсуждается развитие природы. Лаплас описывает происхождение Солнечной системы (1798–1825), а Ламарк — эволюционную теорию (1809). Ученые пошли вглубь микромира. Дальтон формулирует атомистическую теорию (1808), а Шлейден и Шванн в 1838-1839 — клеточную (все организмы состоят из клеток). Происходит более глубокое погружение в микромир. Томсон открывает элементарную частицу — электрон (1897), Ивановский — мельчайший инфекционный агент, вирусы (1892).

В 1900 г. начинается новая революция в науке. Планк формулирует идею о квантах, де Фриз, Корренс и Чермак переоткрывают законы Менделя. Начинается генетика, — гены «кванты биологии». Беккерель открывает радиоактивность (1896), Резерфорд формулирует закон радиоактивного распада (1903) — атом нестабилен. Коржинский формулирует теорию гетерозиса, де Фриз — мутационную теорию (1899-1903). Наследственность также изменчива. Появляются обобщающие теории: квантовая механика (1925-1927) и хромосомная теория наследственности (1915). К революции в физике XX в. относят и теорию относительности Эйнштейна (1905-1915). Аналог в биологии — «Происхождение видов» Дарвина (1859), несмотря на большой интервал между ними. Синтетическая теории эволюции объединила генетику и дарвинизм, молекулярная биология дает объяснение на молекулярном уровне.

Обсуждается уже возникновение Вселенной и жизни. Хаббл в 1925 доказывает существование галактик, в 1929 формулирует закон расширения Вселенной — путь к Большому взрыву. Опарин формулирует первую научную теорию происхождения жизни (1924). Радиационная генетика соединяет биологию и физику: Мёллер доказывает мутагенность рентгеновских лучей на дрозофиле (1926), Тимофеев-Ресовский формулирует законы радиационной генетики и определяет размер гена (1935).

С середины XX века биология и физика так специализировались, что аналогии в их развитии найти стало труднее, но это можно попытаться сделать и для данного этапа развития.

Физика атомного ядра и частиц



УДК: 53.08

Изучение возможности регистрации выбивания электронами протонов и кластеров из ядер

А. Аламури¹, А.А. Дзюба^{1,2}

E-mail: st123089@student.spbu.ru

¹Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, Россия

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ имеет огромный опыт в проведении экспериментов с использованием метода активной мишени [1-2]. В этом методе время-проекционная камера (ВПК) является одновременно газовой мишенью и детектором частиц отдачи. Во время тестовых измерений, проведенных с использованием прототипа ВПК в 2018 г. на ускорителе электронов МАМІ (г. Майнц, Германия), наблюдалось выбивание протонов и дейтронов из ядер гелия и азота при энергии налетающего электрона 720 МэВ. Предлагается провести цикл исследований и определить дифференциальные сечения выбивания протонов и кластеров (дейтронов и ядер гелия) на различных газовых мишенях (He, CH₄, N₂, Ar) при различных энергиях электронного пучка.

Одним из возможных вариантов проведения эксперимента является использование линейного ускорителя электронов ЛИНАК-200, расположенного в Дубне, который в настоящее время находится в стадии запуска.

Для проведения этого эксперимента в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ разрабатывается ВПК с диаметром зоны активной мишени 100 мм, шириной дрейфового промежутка 100 мм и рабочим давлением до 25 бар.

На данный момент для подготовки предложения по проведению эксперимента проводится моделирование установки с помощью пакета программ GEANT4. Определена структура детектора; исследовано влияние электронных шумов, а также шумов, наведенных пучком электронов, на угловое и энергетическое разрешение установки; создан алгоритм идентификации типа частицы отдачи.

1. J. P. Burq et al., Nuclear Physics, B 217, 285-335 (1983), "Soft pp and pp Elastic Scattering in the Energy Range 30-GeV to 345-GeV"
2. Г.Д. Алхазов и др., Физика элементарных частиц и атомного ядра, Т. 53, вып. 3, стр. 661-691 (2022), "Исследование структуры экзотических ядер на установке с активной мишенью ИКАР методом упругого рассеяния протонов в инверсной кинематике"

УДК: 53.08

Подготовка эксперимента по комптоновскому рассеянию на ядрах водорода и гелия с помощью активной мишени

А.Ю. Арутюнова¹, Е.М. Маев¹, А.А. Дзюба¹

E-mail: arutiunova_ai@npi.nrcki.ru

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, Россия*

Цель эксперимента – определение поляризуемости нуклона. Поляризуемость – это одно из фундаментальных свойств нуклона, которое характеризует степень его деформации под действием внешнего электромагнитного поля. Её возможно определить при измерении зависимостей дифференциальных сечений комптоновского рассеяния от энергии и угла рассеяния фотонов θ_γ [1]. В ПИЯФ был разработан новый метод исследования этого процесса с использованием активной мишени, которая одновременно является газовой мишенью и детектором частиц отдачи [2]. Исследование систематических и статистических ошибок показало преимущество эксперимента – более высокую точность определения величин поляризуемости за счет проведения относительных измерений.

На данный момент для подготовки предложения по проведению эксперимента проводится моделирование установки с помощью пакета программ GEANT4. Проведены расчеты энергетических спектров тормозного излучения гамма-квантов, образующихся при взаимодействии пучка электронов с мишенью.

Одним из возможных вариантов проведения эксперимента является использование линейного ускорителя электронов ЛИНАК-200, расположенного в Дубне, который в настоящее время находится в стадии запуска.

1. V.A. Petrun'kin, Sov. J. Part. Nucl. 12 (1981) 278.
2. O. Yevetska, S. Watzlawik, J. Ahrens, G.D. Alkhazov, V.P. Chizhov, E.M. Maev et al., Nuclear instruments and methods, A 618, 160-167 (2010) "New experimental method for investigation of the nucleon polarizabilities"

Спектрометрические характеристики пластикового сцинтилляционного детектора на основе полистирола

Р.Р. Биктимиров^{1,2}, Д.В. Попов^{1,2}

E-mail: Viktimirov_RR@nrcki.ru

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

На сегодняшний день пластиковые сцинтилляторы используются для регистрации гамма-, бета- и нейтронного излучений в ядерной физике, физике высоких энергий, физике элементарных частиц, дозиметрии, радиохимии, ядерной медицине [1,2]. Определение основных спектрометрических характеристик подобных органических сцинтилляторов в низкоэнергетической области затруднительно и, как правило, сводится к сравнению с характеристиками эталонных (антрацен, стильбен) образцов [3,4]. В настоящей работе описан метод абсолютных калибровок по краю комптоновского распределения.

Проведена серия экспериментов, в ходе которых образец пластикового детектора размерами (70 x 5 x 5) см был облучен источниками радиоактивного излучения с соответствующими энергиями гамма-квантов: ²²Na (0,511 МэВ и 1,275 МэВ), ⁶⁵Zn (1,116 МэВ) и ¹³⁷Cs (0,662 МэВ). Источники перемещались вдоль длины детектора с шагом 5 см. Сигнал снимался с торцов детектора двумя идентичными вакуумными ФЭУ «GoHi N4021-2». Для оптимизации светособирания и достижения минимальной неоднородности проведено сравнение вклада диффузного (тайвек) и зеркального (майлар) отражателей в различных комбинациях. Проведена калибровка энергетической шкалы: измеренные зарядовые спектры были аппроксимированы модельной зависимостью, основанной на Монте-Карло моделировании; определены положения краев комптоновских распределений.

Показано, что наилучшее светособирание и наименьшая неоднородность достигаются при использовании тайвека. В области энергий от 0,340 до 1,062 МэВ шкала является линейной. В данном диапазоне энергий для наилучшей конфигурации получена кривая относительного разрешения. Для энергии 1 МэВ его значение составило (10,3±0,9)% (в единицах ПШПВ).

1. Машкович В.И., Кудрявцева А.В. Защита от ионизирующих излучений: Справочник-М: Энергоатомиздат, 1995.
2. Громыко М.В., Крымов А.Л., Игнатьева О.В. Сцинтилляционный β-радиометр: особенности применения и выбор детектора // Физика. Технологии. Инновации: сборник научных трудов. 2015. № 1. С. 47-53.
3. Brooks F.D. Development of organic scintillators // Nuclear Instruments and Methods. 1979. V. 162. P. 477-505.
4. ELJEN TECHNOLOGY [Электронный ресурс]: General purpose EJ-200, EJ-204, EJ-208, EJ-212. URL: <http://www.eljentechnology.com/products/plastic-scintillators/ej-200-ej-204-ej-208-ej-212>.

Моделирование отклика детектора «Ковёр-3» с помощью Geant4

Васильев Н.А.¹, Джатдоев Т.А.², Романенко В.С.³, Коллаборация «Ковёр-3»³

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

²Институт ядерных исследований Российской академии наук, Москва, Россия

³Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова (НИИЯФ МГУ), Москва, Россия

Космические лучи высоких энергий порождают широкие атмосферные ливни (ШАЛ). В основе представлений о процессах в ливнях лежит модель ядерного каскада. Широкий атмосферный ливень считают гигантским электронно-ядерным ливнем. В этом ливне генерируются электронно-фотонная, мюонная и адронная компоненты, излучение Вавилова-Черенкова, радиоизлучение и др. Первые шаги, сделанные в этом направлении, дали возможность объяснить его основные особенности.

В настоящее время в Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН работает комплексная ливневая установка «Ковёр-3», измеряющая поток космических гамма-квантов с энергией выше 100 ТэВ. Установка находится на высоте 1700 метров над уровнем моря. Модули установки «Ковёр-3» содержат сцинтилляционные детекторы с пластиковым сцинтиллятором и с жидкостным сцинтиллятором в пластиковых упаковках. В результате взаимодействия гамма-квантов с атмосферой генерируются ШАЛ, компоненты которого регистрируются сцинтилляторами. Также установка включает в себя мюонный детектор с энергетическим порогом в 1 ГэВ для вертикальных мюонов [1].

В нашей работе производится оценка зависимости эффективности регистрации установкой первичных гамма-квантов от их энергии. Широкие атмосферные ливни от первичных частиц сгенерированы при помощи программного комплекса CORSIKA. Затем с использованием кода на Geant4 [2] определялся отклик на смоделированные ливни. Далее с помощью скрипта на языке Python [3] отклики подвергались дополнительной обработке для получения итогового результата. На данный момент ведётся активная работа улучшению моделирования: учитывается мюонный детектор, выносные пункты вокруг центрального детектора; внедряется метод восстановления направления прихода ливня по временам срабатывания триггера детекторов.

1. V. S. Romanenko, D. D. Dzhappuev & The Carpet-3 Collaboration The Recent Result of the Carpet-2 Facility and Status of the Carpet-3 Facility
2. GEANT4 Collaboration S. Agostinelli(Genoa U.) GEANT4--a simulation toolkit
3. Van Rossum, G. & Drake, F.L. Python 3 Reference Manual

Исследование редких распадов В-мезонов на детекторе LHCb Большого адронного коллайдера**И.С. Дьячков¹**

E-mail: igor.diachkov@cern.ch

¹Университет науки и технологий МИСИС

Кварковые переходы типа $b \rightarrow sll$ представляют большой интерес для исследований, так как они подавлены на древесном уровне Стандартной модели. Следовательно, процессы с такими переходами чувствительны к проявлениям Новой физики. Однако для их изучения требуются качественные экспериментальные данные, высокая статистика и точное моделирование. Детектор LHCb специализируется на исследовании адронов, содержащих b -кварки [1].

Последние экспериментальные результаты говорят о выполнении лептонной универсальности в распадах В-мезонов [2]. Однако в ходе детальных исследований в этой области были обнаружены незначительные расхождения со Стандартной моделью, вызвавшие интерес у теоретиков. В докладе будут представлены последние результаты, опубликованные коллаборацией LHCb, в том числе анализ распада $B^0 \rightarrow K^{*0} \mu^+ \mu^-$ [3].

Реконструкция мюонного канала такого распада проще, чем электронного, вследствие малого влияния тормозного излучения. В данном анализе впервые использовался полный спектр двух мюонов без наложения вето на окрестности больших резонансов. В моделирование были включены локальные, одночастичные и двухчастичные нелокальные амплитуды и фазы, что позволяет учесть интерференцию и повысить точность измерений. Основным результатом является измерение коэффициентов Вильсона $C_9^{(\prime)}$ и $C_{10}^{(\prime)}$, а также C_{9T} , выражающего вклад от дополнительной петли таонов. Измеренные величины согласуются со Стандартной моделью, за исключением C_9 , имеющего отклонение на уровне 2.1σ .

1. LHCb collaboration, A. A. Alves Jr. et al., The LHCb detector at the LHC // JINST 3 (2008) S08005
2. LHCb collaboration, R. Aaij et al., Test of lepton universality in $b \rightarrow s l^+ l^-$ decays // Phys.Rev.Lett. 131 (2023) 5, 051803
3. LHCb collaboration, R. Aaij et al., Comprehensive analysis of local and nonlocal amplitudes in the $B^0 \rightarrow K^{*0} \mu^+ \mu^-$ decay // JHEP 09 (2024) 026

Вычисление поправки Вихмана-Кролла вакуумной поляризации в водородоподобных ионах методом конечного базиса

В.К. Иванов, Д.А. Глазов

E-mail: vladislav.ivanov@metalab.ifmo.ru

Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Вычисление радиационных поправок, таких как поправки от собственной энергии электрона или вакуумной поляризации (ВП), является необходимым для точного описания спектров атомных систем [1]. Удобной системой для изучения таких эффектов являются тяжелые водородоподобные ионы, в которых, с одной стороны, поля достаточно сильны для проявления квантовоэлектродинамических эффектов, а с другой, которые являются достаточно простыми для теоретического описания.

Для простейших потенциалов возможно написать функцию Грина для водородоподобной системы, интегрируя которую можно найти вклад ВП численно. Однако для более сложных случаев, аналитическое выражение для функции Грина написать не представляется возможным. Для некоторых случаев, достаточно вычислить вклад старшего порядка (потенциал Юлинга), но для изучения более тонких эффектов нужно учитывать поле ядра точно. Различные подходы к этой проблеме, связанные с использованием функции Грина, могут быть сложными в использовании, поэтому представляет интерес поиск других подходов. Так, для изучения диаграмм собственной энергии, успешно применяется метод конечного базисного набора, в котором волновые функции ищутся как взвешенная сумма базисных функций [3]. Однако для вычисления ВП этот метод был применен лишь недавно: в статье [2] были вычислены плотности заряда ВП для основного парциального вклада с помощью базиса гауссовых функций. Преимуществом данного метода является то, что учет произвольного вида потенциала не усложняет вычисления, так как интегрирование здесь происходит только при нахождении матричных элементов Гамильтониана.

В этой работе, мы вычислили поправки Вихмана-Кролла $\alpha(Z\alpha)^{n>1}$ [4] к энергии, используя метод конечного базисного набора. Для этого, нами были вычислены плотности ВП для парциальных вкладов до $|k|=5$. Вычисления были выполнены с размером базисного набора до $n=120$. Одной из трудностей при использовании гауссового базиса является то, что матрица перекрытия для базисных функций может становиться плохо определенной для большого размера базиса. Мы обошли эту сложность, применив вычисления с произвольной точностью. Полученные результаты сопоставлены с работой [5]. Точность полученных результатов для основного состояния электрона сопоставима с результатами, полученными традиционными методами [1, 5].

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ: «Квантовоэлектродинамические эффекты в многоэлектронных многозарядных ионах». Номер соглашения: 21-12-00258 от 18.05.2022

1. Mohr P.J, Plunien G., Soff G. QED corrections in heavy atoms // Physics Reports. 1998. V. 293. No. 5-6. P. 227–369.
2. Salman M., Saue T. Calculating the many-potential vacuum polarization density of the Dirac equation in the finite-basis approximation // Phys. Rev. A. 2023. V. 108. No. 1. P. 012808.
3. Johnson, W. R., Blundell, S. A., Sapirstein, J. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines // Phys. Rev. A. 1988. V. 32 No. 2. P. 307–315.
4. Wichmann, E. H., Kroll, N. M. Vacuum polarization in a strong coulomb field // Phys. Rev. 1956. V. 101, P. 843-859.
5. Persson, H., Lindgren, I., Salomonson, S., Sunnergren, P. Accurate vacuum-polarization calculations // Phys. Rev. A. V. 48. P. 2772-2778 (1993).

УДК: 539.123, 539.163.1

Первые результаты прецизионных измерений периода полураспада ^{71}Ge , выполненные с целью поиска решения «галлиевой аномалии»

*Д.В. Иванов, А.В. Дербин, И.С. Драчнев, В.Н. Муратова, Д.А. Семенов, М.В. Трушин,
Е.В. Унжаков*

E-mail: ivanov_dv@npni.nrcki.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Результат для потока pp -нейтрино, полученный радиохимическими детекторами SAGE и GALLEX/GNO в реакции $\nu_e + ^{71}\text{Ga} \rightarrow ^{71}\text{Ge} + e^-$, составил 80% от ожидаемого. Измерения с искусственным источником нейтрино ^{51}Cr , проведённые в БНО, показали нехватку нейтрино на уровне 5σ , существенно усилив статистическую значимость, полученную в экспериментах с солнечными нейтрино. Одно из возможных объяснений «галлиевой аномалии» связывается с осцилляциями нейтрино в стерильное состояние [1].

Мы представляем первые результаты измерения периода полураспада $T_{1/2}(^{71}\text{Ge})$, полученные в ходе 4800 часов работы спектрометра на основе Si(Li)-детектора [2]. Источник ^{71}Ge был получен на ускорителе в реакциях (n, xn) и (p, xp) с мишенью из природного германия. Измеренные спектры обрабатывались с учётом дополнительного вклада от распадов $^{71}\text{As} \rightarrow ^{71}\text{Ge}$ ($T_{1/2} \approx 65.3$ ч), $^{68}\text{Ge} \rightarrow ^{68}\text{Ga}$ ($T_{1/2} \approx 270.9$ суток) и распадов других наработанных радионуклидов. Результирующая кривая распада ^{71}Ge подгонялась суммой соответствующих компонент, которые определялись временами жизни дочерних ядер.

В результате подгонки получено значение $T_{1/2}(^{71}\text{Ge}) = 11.4645 \pm 0.0036$ суток ($\chi^2 / \text{ndf} = 4674 / 4615$; $P = 0.27$), которое согласуется с ранее измеренными, но является в 2–8 раз более точным [3, 4].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-12-00046).

1. Elliott S. R., Gavrin V. N., Haxton W. C. The gallium anomaly // *Progress in Particle and Nuclear Physics*. 2024. Vol. 134. doi: 10.1016/j.pnnp.2023.104082.
2. Alekseev I. E. et al. Precision measurement of the ^{210}Bi β -spectrum // *Physical Review C*. 2020. Vol. 102. doi: 10.1103/PhysRevC.102.064329.
3. Norman E. B. et al. On the Half-Life of ^{71}Ge and the Gallium Anomaly // *Physical Review C*. 2024. Vol. 109. doi: 10.1103/PhysRevC.109.055501.
4. Collar J. I., Yoon S. G. New Measurements of ^{71}Ge Decay: Impact on the Gallium Anomaly // *Physical Review C*. 2023. Vol. 108. doi: 10.1103/PhysRevC.108.L021602.

Моделирование экспериментов по отклонению протонов изогнутыми кристаллами на синхроциклотроне ПИЯФ

П. Ю. Иванова¹

E-mail: pouriva@gmail.com

¹НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В крупнейших ускорительных центрах таких, как ОИЯИ, ИФВЭ, ЦЕРН, Фермилаб, БНЛ, активно используются изогнутые кристаллы для управления траекториями частиц высоких и сверхвысоких энергий [1]. В основе этих исследований лежит эффект каналирования – частица, попавшая под малым углом в пространство между двумя плоскостями ориентированного кристалла, под действием электрического поля движется вдоль кристаллографических плоскостей.

В недавно выполненном на синхроциклотроне ПИЯФ эксперименте по каналированию протонов с энергией 1 ГэВ эффективность отклонения частиц на 3 мрад составила около 30 % [2], в последующем эксперименте угол отклонения увеличен до 6 мрад, что открывает возможности применения изогнутых кристаллов в области промежуточных энергий. Планируется провести серию экспериментов по исследованию ориентационных эффектов в кремниевых кристаллах разной длины от 1 мм до 7 мм для протонов с энергией 200, 500 и 1000 МэВ. Это позволит определить области возможных применений кристаллов для развития пучковой инфраструктуры синхроциклотрона ПИЯФ, а также перспективы использования на установках адронной терапии.

Для получения предварительной оценки таких важных характеристик, как угол отклонения, эффективность отклонения, расходимость каналированного пучка, выполнено моделирование предполагаемых экспериментов при помощи программы [3]. Результаты расчетов будут представлены в докладе.

1. V.M. Biryukov, Y.A. Chesnokov, V.I. Kotov. Crystal channeling and its application at high-energy accelerators. Berlin: Springer Science & Business Media, 2013. 219 с.
2. Эксперимент по высокоэффективному отклонению протонного пучка с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом на синхроциклотроне ПИЯФ / Д. А. Амерканов, Л. А. Вайшнене, Ю. А. Гавриков, Б.Л. Горшков, А.С. Денисов, Е.М. Иванов, П.Ю. Иванова, Ю.М. Иванов, М.А. Кознов, В.И. Мурзин, Л.А. Щипунов // Письма в ЖЭТФ. 2023. № 118. С. 551-556.
3. П.Ю. Иванова. Моделирование эксперимента по высокоэффективному отклонению протонов с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом. СПбГУ: магистр. дисс., 2024.

Сверхтонкие магнитные аномалии в изотопах ртути***Е.А. Коновалова,¹ Ю.А. Демидов,^{1,2} М.Г. Козлов^{1,2}***

E-mail: lenaakonovalova@gmail.com

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский Институт», Гатчина, Россия*²*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова, Санкт-Петербург, Россия*

В последние годы точность, достигнутая в лазерной спектроскопии, в совокупности с развитием атомной теории позволили использовать измеренные магнитные дипольные константы сверхтонкой структуры (СТС) для проверки различных моделей ядра. Константы СТС зависят от распределения заряда и намагниченности внутри атомного ядра. В приближении точечного ядра отношение постоянных СТС для двух изотопов равно отношению их g -факторов. Рассматривая ядра конечных размеров, необходимо учитывать распределение намагниченности по ядру и радиальную зависимость электронной волновой функции внутри ядра. Первая поправка называется магнитной (Бора–Вайскопфа), вторая – зарядовой (Брейта–Розенталь). Эти поправки нарушают пропорциональность между константами СТС и ядерными g -факторами, что получило название сверхтонкой магнитной аномалии. Величина СМА в основном определяется разностью поправок Бора – Вайскопфа двух изотопов. Для некоторых элементов СМА может быть экспериментально измерена. Из этих данных можно установить соотношения между поправками Бора – Вайскопфа.

Известно, что с уменьшением ядерного g -фактора величина поправки Бора – Вайскопфа возрастает, впервые эта закономерность была обнаружена для изотопов ртути [1]. Мы наблюдали увеличение поправок Бора – Вайскопфа с уменьшением ядерных g -факторов для изотопов $3/2^+$ калия и золота [2, 3]. Причиной сингулярного поведения поправок Бора – Вайскопфа является сложение спиновой намагниченности всех нуклонов и вклада от орбитального движения протона. Изотопы ртути имеют валентный нейтрон, его орбитальное движение не даёт вклада в намагниченность, поэтому зависимость поправки Бора – Вайскопфа от ядерного g -фактора другая. Характер этой зависимости обсуждается в докладе.

Мы рассматриваем поправку Бора – Вайскопфа как произведение атомного и ядерного множителей [4]. Ядерный множитель почти не зависит от заряда ядра. Атомный множитель зависит: для лёгких элементов – квадратично, для тяжелых – линейно. Это можно учесть в расчёте электронной структуры. Таким образом, можно сравнивать ядерные множители разных химических элементов, и модифицировать одночастичную модель ядра.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 23-22-00079.

1. P. A. Moskowitz, M. Lombardi, “Distribution of nuclear magnetization in mercury isotopes,” *Phys. Lett. B*, 46, 334 (1973).
2. Yu. A. Demidov, et al., “Bohr-Weisskopf effect in the potassium isotopes,” *Phys. Rev. C*, 107, 024307 (2023).
3. Yu. A. Demidov, et al., “Atomic calculations of the hyperfine-structure anomaly in gold,” *Phys. Rev. A*, 103, 032824 (2021).
4. E. A. Konovalova, Yu. A. Demidov, M. G. Kozlov, “Calculation of the hyperfine magnetic anomaly in many-electron atoms”, *Optics and Spectroscopy*, 128, 1530 (2020).

С.А. Куделя, В.С. Малышевский, Г.В. Фомин

E-mail: kudelya@sfedu.ru

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Тритий (Т) – является радиоактивным изотопом водорода с большим периодом полураспада (порядка 12 лет), изотоп образуется в ходе ядерных реакций происходящих в атмосфере под действием космических лучей, кроме того, вырабатывается в ходе работы предприятий ядерного цикла, таким образом является глобальным загрязнителем атмосферы и гидросферы [1]. Будучи химически аналогичным водороду, тритий участвует в круговороте воды, ввиду чего способен поступать во все живые организмы вместе с водой и в дальнейшем вызывать мутагенные изменения как за счёт воздействия β -излучения, так и изменения структуры молекул в результате замены водорода на нейтральный ^3He . Таким образом, концентрация трития может служить маркером для целей дозиметрического контроля, анализа атмосферных процессов и исследований космических ливней. В то же время определение естественной концентрации космогенного трития усложняется невозможностью прямых замеров, так как количество трития, выброшенное в атмосферу в ходе термоядерных испытаний в 20 веке на порядки больше, чем его естественное содержание, таким образом задача определения естественной концентрации становится сугубо теоретической. Именно моделирование образования и переноса трития в атмосфере Земли является целью данной работы.

В настоящей работе проанализирован вклад реакций (n, X) и (p, X) на ядрах азота и кислорода, как наиболее распространённых в атмосфере газов, в производство космогенного трития. Расчет потоков налетающих частиц в ядерно-электромагнитном каскаде производился с использованием аналитической модели «PARMA» [2]. Была решена задача переноса трития в атмосфере в результате вертикальной турбулентной диффузии и получена зависимость его концентрации от высоты (рис. 1). Для проведения вычислений использовался интегро-интерполяционный метод.

Из полученной зависимости был оценён общий запас космогенного трития в земной атмосфере, он составил $\sim 1.9 \cdot 10^{17}$ Бк. Расчеты показали, что в атмосфере содержится не более 10% от всего космогенного трития. Полученные результаты в целом согласуются с более ранними эмпирическими и полуэмпирическими моделями [3], подтверждающими, в том числе, что техногенный тритий составляет большую часть его полного запаса.

1. Fairlie I. Tritium hazard report: pollution and radiation risk from Canadian nuclear facilities. June 2007. Greenpeace. 92 p. Available at: https://www.researchgate.net/publication/237319950_Tritium_Hazard_Report_Pollution_and_Radiation_Risk_from_Canadian_Nuclear_Facilities.
2. Sato T., Yasuda H., Niita K., Endo A., Sihver L. Development of PARMA: PHITS-based analytical radiation model in the atmosphere, Radiation research. 2008;170(2):244–259. <https://doi.org/10.1667/RR1094.1>
3. Desyatov D.D., Ekinin A.A. Evaluation of tritium's entry into the environment from nuclear power plants' emissions. Biosphere compatibility: people, region, technologies. 2018;1(21):88–96. (In Russ.) Available at: https://www.elibrary.ru/download/elibrary_34959688_46935708.pdf

Определение количественных характеристик вещества мишеней, используемых на времяпролетном спектрометре ГНЕЙС

Н.М. Ольхович

E-mail: olhovich_nm@npri.nrcki.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

В работе представлен метод определения количественных характеристик вещества мишеней, используемых в экспериментах на времяпролетном спектрометре ГНЕЙС [1]. В настоящее время на спектрометре ведутся работы по определению сечений и угловых распределений осколков деления [2]. Поскольку измерения проводятся относительно стандарта – сечения деления ^{235}U , особое значение приобретает задача определения количественных характеристик мишени ^{235}U . Результаты определения таких характеристик для мишени ^{235}U приведены в данной работе.

Метод основан на подсчете количества альфа-частиц, испускаемых мишенью в вакуумный объем с простой геометрией и использованием коэффициента эффективности, рассчитанного методом Монте-Карло. Установка состоит из полупроводникового детектора и мишени, помещённых в вакуумный объем. Счётная система состоит из двух частей: аналоговой и цифровой. Аналоговая часть - предусилитель, дискриминатор и счетчик сигналов; цифровая – оцифровщик сигналов, управляемый сигналом с дискриминатора.

1. N. K. Abrosimov, G. Z. Borukhovich, A. B. Laptev, V.V. Marchenkov, G. A. Petrov, O. A. Shcherbakov, Yu. V. Tuboltsev, and V. I. Yurchenko, Neutron time-of-flight spectrometers GNEIS at the Gatchina 1 GeV proton synchrotron, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 242, 121 (1985).
2. А. С. Воробьев, А. М. Гагарский, О. А. Щербаков, Л. А. Вайшнене, А. М. Тягельская, Н. М. Ольхович, А. Л. Барабанов Измерение сечения деления ядер ^{237}Np нейтронами с энергиями 0.3–500 МэВ, Письма в ЖЭТФ, 2024, том 120, вып. 6, с. 385 – 392.

Разработка модуля антинейтринного детектора***Д.С. Прокопов^{1,2}, Д. А. Чмыхало^{1,2}***

E-mail: Prokopov_DS@nrcki.ru

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

На текущий момент в России активно развивается малая атомная энергетика (МАЭ) с целью обеспечения энергоресурсами удалённых районов и производств. В частности перспективным считается производство плавучих атомных энергоблоков (ПАЭБ)[1]. В связи с этим развитие атомной промышленности потребовало введения средств мониторинга количества и качества ядерного материала, находящегося в корпусе реактора, для обеспечения безопасности развития атомной энергетике. Возможным решением этой проблемы представляется измерение энерговыработки реактора при помощи детектирования реакторных антинейтрино.

Использование нейтринного метода контроля ядерных реакторов было предложено и изучено в Курчатовском институте в 1980-1990-х гг.[2,3]. Реакторные антинейтрино служат индикаторами протекания цепной реакции деления в активной зоне реактора. Эти антинейтрино могут быть зарегистрированы с помощью реакции обратного бета-распада[4]. В качестве антинейтринного детектора можно использовать спектрометр на основе пластикового сцинтиллятора.

Целью данной работы является разработка модуля детектора реакторных антинейтрино.

Для решения этой задачи была построена модель с помощью СПО GEANT4. Модуль представляет собой сборку пластикового сцинтиллятора формы параллелепипеда из полистирола, покрытого тонким слоем нейтронного поглотителя $B_2O_3:ZnS$. Каждый из торцов сцинтиллятора просматривается фотоэлектронными умножителями.

Первоначально была проведена оптимизация размеров пластикового сцинтиллятора. Их определение опирается на ряд условий: должно достигаться максимальное светособирание в сцинтилляторе, а также преимущественный захват нейтронов в поглотителе. Последнему условию соответствует достижение минимально возможной эффективности захвата нейтронов на водороде, но при этом максимальной эффективности их замедления до тепловых энергий. В результате систематизации смоделированных данных определен оптимальный размер пластикового сцинтиллятора, равный 6·6·70 см.

Также было проведено исследование зависимости эффективности захвата нейтронов в поглотителе от его толщины. Необходимо учитывать, что борный сцинтиллятор является непрозрачным к собственному излучению, что накладывает ограничение на его максимальный размер. Поэтому исследование было проведено в диапазоне толщины поглотителя 0-1мм. Получено, что эффективность захвата нейтронов растёт по мере увеличения размера поглотителя и достигает 35% при его толщине 1 мм.

В результате проведенных исследований определены некоторые оптимальные характеристики модуля детектора реакторных антинейтрино, которые позволят наиболее эффективно регистрировать продукты реакции обратного бета-распада.

1. Нейтринный контроль реакторов для применения гарантий МАГАТЭ к плавучим атомным энергоблокам / В. П. Кучинов, М.Д. Скорохватов, Е. П. Велихов, В. П. Кузнецов // ВАНТ. 2022.
2. Mikaelyan L. A. Neutrino laboratory in the atomic plant // in Proceeding of the International Conference "Neutrino 77". 1978.
3. Mikaelyan L. A. Borovoi A. A. Possibilities of the practical use of neutrinos // Soviet Atomic Energy. 1978.
4. Фаянс С.А. Радиационные поправки и эффекты отдачи в реакции $\nu_e + p \rightarrow n + e^+$ при низких энергиях // Ядерная физика. 1985. т.42. № 4(10).

Search for T, P-violating axionlike-particle-mediated interactions in diatomic molecules*S.D. Prosnnyak¹, L.V. Skripnikov^{1,2}*E-mail: prosnnyak.sergey@yandex.ru¹*Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov of National Research Centre «Kurchatov Institute», Gatchina, Russia*²*Saint Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russia*

Molecules that contain heavy element atoms can be used to investigate "new" physics beyond the Standard Model through precision experiments aimed at detecting violations of spatial parity (P) and time reversal (T) symmetries in fundamental interactions. A frequently discussed source of T and P violation in molecules is the electron electric dipole moment (eEDM) [1]. While a non-zero eEDM has not yet been detected, limits on its magnitude have been established. The most stringent constraint so far was achieved by the JILA group in their experiment with the hafnium monofluoride (HfF⁺) molecular cation [2]. Furthermore, an upcoming experiment with the barium monofluoride (BaF) molecule is expected to provide a similarly close independent constraint [3].

The violation of time reversal (T) and parity (P) symmetries in fundamental interactions within molecules can arise not only from the eEDM but also from the exchange of virtual axionlike particles between electrons and between electrons and nuclei. In this study, we investigated this phenomenon in the HfF⁺ molecular cation and the BaF molecule. Our calculations for the electron-nucleus interaction took into account the finite size of the nucleus. By examining the molecular parameters associated with these interactions, we established constraints on the products of interaction coupling constants that correspond to the current sensitivity of HfF⁺ experiment [2] and the expected sensitivity of future BaF experiment [3]. The findings were published in references [4] and [5]. Additionally, we will present new insights on parity violation effects that were not covered in those publications.

Calculation of potential energy surface were supported by the Russian Science Foundation Grant No. 24-12-00092. Calculations of matrix elements and development of corresponding code were supported by the Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics "BASIS" Grant according to Project No. 24-1-1-36-2.

1. Safronova M.S., Budker D., DeMille D., Kimball D.F.J., Derevianko A., Clark C.W. (2018). *Reviews of Modern Physics* 90.2: 025008.
2. Roussy T.S., Caldwell L., Wright T., Cairncross W. B., Shagam Y., Ng, K.B., ... & Cornell E. A. (2023). *Science* 381.6653: 46-50.
3. A. Boeschoten et al., arXiv:2303.06402 (2023)
4. S. D. Prosnnyak, D. E. Maison, L. V. Skripnikov, Updated Constraints on T, P-Violating Axionlike-Particle-Mediated Electron–Electron and Electron–Nucleus Interactions from HfF⁺ Experiment, *Symmetry* 15(5), 1043 (2023).
5. S. D. Prosnnyak, L. V. Skripnikov, Axion-mediated electron-nucleus and electron-electron interactions in the barium monofluoride molecule, *Phys. Rev. A* 109, 042821 (2024).

Интеграция системы сбора данных FERS для калориметров на стенде miniSPD

С. Ромахов¹, Т.Л. Еник¹, О.П. Гавришук¹

E-mail: romakhov@jinr.ru

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Представленная работа была проведена в рамках установки miniSPD, которая служит для испытаний всех типов детекторов, предназначенных для установки Spin Physics Detector (SPD) на коллайдере NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility) [1]. Проект NICA направлен на изучение свойств материи в условиях экстремальных плотностей и температур, что позволит исследовать взаимодействие частиц и состояния вещества при высоких энергиях. Настоящая работа сосредоточена на тестировании электромагнитных калориметров и других детекторов, а также проверке применимости передовой электроники Front-end Redout System (FERS) DT5202 [2-3].

Испытания проводились с целью оценки чувствительности и точности системы, а также проверки её возможности эффективно обрабатывать сигналы и анализировать данные. Дополнительная задача заключалась в разработке алгоритмов первичной фильтрации данных и выбора значимых событий с использованием CERN ROOT [4], чтобы обеспечить надежную регистрацию космических лучей и других частиц.

Калориметр, состоящий из 190 чередующихся слоев (1,5 мм полистирольного сцинтиллятора и 0,5 мм свинца), имеет длину около 490 мм, из которых активная часть составляет 380 мм [5]. Свет собирается с помощью WLS-волокон (Y-11) и передается на фотодиод (MPPC). Каждый калориметр содержит 4 башни с выводом на фотодиод, подготовив переходные платы для электроники FERS были получены 16 независимых каналов считывания. После калибровки фотодиодов были получены экспериментальные данные. Для фильтрации и анализа данных разработан алгоритм выбора событий, в рамках которого учитывались только вертикальные треки, соответствующие прохождению мюонов почти перпендикулярно поверхности калориметра. Таким образом, отбирались только те частицы, которые проходили через одну башню, при этом все сигналы, зарегистрированные от одной частицы, фиксировались в одном канале. Применение алгоритмов фильтрации данных значительно улучшило качество собираемых данных, также гистограммы были аппроксимированы функциями Ландау, что позволило минимизировать фоновые шумы и получить чистые спектры космических лучей. Также проведена нормировка каналов, после которой стало возможным измерение энергетических потерь частиц в других плоскостях. Также в ходе экспериментов и тестирования электроники на прототипе строу-камеры были получены спектры источников Fe-55 и Ru-106.

Система FERS продемонстрировала высокую гибкость и адаптируемость в интеграции с различными типами детекторов, что подтверждает ее применимость для считывания и анализа данных. Тестирование на установке miniSPD позволило выявить потенциальные улучшения и оптимизировать параметры системы, что значительно повышает надежность последующих экспериментов и упрощает интеграцию таких детекторов, как micromegas, straw и GEM.

1. Kekelidze V. D. NICA project at JINR: status and prospects //Journal of Instrumentation. – 2017. – Т. 12. – №. 06. – С. C06012.
2. CAEN FERS-5200 Front-End Readout System. – URL: <https://www.caen.it/products/dt5202/>.
3. A5202/DT5202 User Manual. – URL: <https://www.caen.it/?downloadfile=6627>.
4. Antcheva I. et al. ROOT—A C++ framework for petabyte data storage, statistical analysis and visualization //Computer Physics Communications. – 2011. – Т. 182. – №. 6. – С. 1384-1385.
5. Abazov V. et al. Technical Design Report of the Spin Physics Detector at NICA //arXiv preprint arXiv:2404.08317. – 2024.

Цифровая обработка результатов измерений параметров нейтронного пучка времяпролётного спектрометра ГНЕЙС

А.М. Тягельская

E-mail: tiagelskaia_am@npni.nrcki.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

В работе представлены результаты цифровой обработки результатов измерений параметров нейтронного пучка времяпролётного спектрометра ГНЕЙС. Измерения параметров нейтронного пучка выполнены с использованием ионизационной камеры деления (ИКД), содержащей мишень из ^{235}U . ИКД используется в качестве монитора нейтронного пучка с атмосфероподобным энергетическим спектром испытательного стенда ИС НП, действующего в НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ на базе протонного синхроциклотрона на энергию 1 ГэВ и нейтронного времяпролетного спектрометра ГНЕЙС [1-2].

На обработку брались данные с 8-битовых оцифровщиков сигнала Acquiris DC-270 с частотой выборки 500 MSamples/s, переведенные в числовой вид, подходящий для обработки машинными (компьютерными) средствами. Средством машинной обработки был выбран язык Python с библиотеками обработки данных NumPy и pandas, библиотекой графического отображения результатов обработки matplotlib. Для ускорения обработки исходных данных и отображения полученных результатов использован интерактивный интерпретатор IPython в варианте веб-блокнота Jupyter.

Одной из основных характеристик нейтронного пучка ИС НП является энергетический спектр (дифференциальный поток) – количество нейтронов, падающих на единицу облучаемой поверхности в единицу времени в единичном интервале энергии (нейтрон / (см² · сек · МэВ)). Графическое отображение энергетического спектра, рассчитанного в данной работе, хорошо согласуется с предыдущими определениями энергетического спектра ИС НП.

Использованный код в дальнейшем будет применен для обработки результатов экспериментов, проводимых на времяпролетном спектрометре ГНЕЙС, что позволит сократить время на цифровую обработку и последующее графическое отображение полученных результатов.

1. Абросимов Н.К., Борухович Г.З., Куликов А.В., Лаптев А.Б., Петров Г.А., Щербаков О.А., Юрченко В.И. Нейтронный времяпролетный спектрометр ГНЕЙС. Препринт ЛИЯФ, 1983
2. Абросимов Н.К., Вайшнине Л.А., Воробьев А.С., Иванов Е.М., Михеев Г.Ф., Рябов Г.А., Тверской М.Г., Щербаков О.А. Создание и экспериментальное исследование пучка нейтронов на синхроциклотроне ПИЯФ для тестирования компонентов электроники на радиационную стойкость. Приборы и техника эксперимента, N4, 2010, с.5.

Прецизионное измерение положения катодных проволок в системе пропорциональных камер высокого давления в эксперименте по измерению зарядового радиуса протона в упругом электрон-протонном рассеянии

Г. В. Филатов¹, П. В. Кравченко¹, П. А. Кравцов¹, Б. В. Бочин¹

E-mail: filatovgwork@gmail.com

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В Петербургском Институте Ядерной Физики предложен проект, цель которого заключается в прецизионном измерении зарядового радиуса протона в электрон-протонных упругих столкновениях [1, 2]. Ключевой особенностью методики эксперимента является одновременная регистрация как рассеянного электрона, так и протона отдачи. Один из важных компонентов этого эксперимента - система многопроволочных пропорциональных камер высокого давления, предназначенная для регистрации трека рассеянного электрона. Для обеспечения точного восстановления координат электронного трека разрабатывается комплексная система измерения положения катодных проволок камеры. В докладе будет представлен текущий статус эксперимента и первые результаты технических сеансов.

Для реализации идеи был предложен анализ профилей изображений камеры, полученных с помощью системы точных микроскопов и координат, измеренных прецизионными электронными линейками. В работе рассмотрены методики определения координат проволок пропорциональных камер, а также проведён анализ распределения профилей каждой из них, что позволило исключить такие негативные факторы, как провисание проволочек [3] и непараллельность расположения проволок.

Особый интерес представляет минимизация ошибки определения координат проволок, что способствует уменьшению ошибки в определении точного радиуса протона в упругом электрон-протонном рассеянии.

1. Воробьёв А. А., Васильев А. А., Белостотский С. Л. PROJECT FOR PRECISION MEASUREMENT OF THE PROTON CHARGE RADIUS IN AN ELECTRON-PROTON SCATTERING EXPERIMENT // High Energy Physics Division. Main scientific activities 2013-2018. Гатчина: НИЦ КИ - ПИЯФ, 2019. С. 316-325.
2. Воробьёв А. А. Proposal to perform an experiment at the A2 hall, MAMI: «High Precision Measurement of the ep elastic cross section at small Q²» -2017.
3. Андреев В.А., Гаврилов Г.Е., Крившич А.Г., Малыхина Н.М., Мезенцева Т.Б., Патричев С.К., Сокольская Р.П., Ясюкевич М.А Принципы расчета и конструирования больших пропорциональных камер с высокой однородностью коэффициента газового усиления. // Препринт ЛИЯФ №1128. 1985.

Аппаратно-программная система для проведения мультикомпонентных исследований широких атмосферных ливней

Е.П. Хомчук¹, М.Б. Амельчаков¹, Д.М. Громушкин¹, С.Ю. Жежера¹, А.Ю. Коновалова¹, С.С. Хохлов¹, И.А. Шульженко¹, Е.А. Южакова¹

E-mail: EPKhomchuk@mephi.ru

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

Космические лучи (КЛ) - единственный инструмент исследования ядро-ядерных взаимодействий при энергиях в сотни ТэВ в системе центра масс. Исследования КЛ высоких энергий проводятся путем регистрации широких атмосферных ливней (ШАЛ), образующихся при взаимодействии частиц с атмосферой Земли. Исследования ШАЛ выявили ряд необычных явлений: «излом» в энергетическом спектре КЛ в области 5 ПэВ; избыток числа мюонов в событиях по сравнению с расчетами по всем существующим моделям при энергиях выше 10^{17} эВ [1]; «выстроенность»; «проникающие каскады»; «кентавры»; «антикентавры»; «гало» [2, 3] и др. На данный момент нет ни одной общепризнанной модели, способной объяснить эти явления в рамках единого подхода.

Ключ к объяснению данных явлений - результаты мультикомпонентных исследований ШАЛ, проводимых в рамках комплементарного подхода к анализу данных.

Такой подход реализуется в Экспериментальном комплексе (ЭК) НЕВОД [4], объединяющем шесть установок для исследования событий по трем компонентам ШАЛ: электронно-фотонной, мюонной и адронной.

В результате работы установок ЭК формируется объемный поток данных, содержащих топологическую, триггерную, координатную, амплитудную и временную информацию о зарегистрированных событиях. Также для верификации получаемых результатов и разработки новых методов ведется моделирование ШАЛ и откликов установок. Для хранения и эффективного анализа экспериментальных и моделированных событий установок, а также развития комплементарного подхода к анализу данных в ЭК НЕВОД создается высокопроизводительная аппаратно-программная система.

Система предназначена для решения следующих задач: моделирование ШАЛ, процессов прохождения КЛ в гелиосфере и околоземном пространстве, откликов детекторов и установок; обработка и анализ экспериментальных и моделируемых данных; обучение нейронных сетей для реконструкции событий и развития новых методов и подходов к анализу данных; надежное хранение информации; организация и унификация хранения данных детекторов и установок ЭК НЕВОД.

В докладе представлены задачи и особенности создаваемой системы, ее состав и архитектура, а также схема хранения информации. Приводится описание структуры баз экспериментальных и моделированных данных отдельных установок и всего комплекса.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-72-10010).

1. Богданов А.Г. и др. Исследование характеристик потока и взаимодействия космических лучей сверхвысоких энергий с помощью метода спектров локальной плотности мюонов. // Ядерная физика. 2010. Т. 73. С. 1904-1920.
2. А.А. Петрухин, А.Г. Богданов. Тяжелые частицы на ЛНС и в космических лучах. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48. Вып. 5. С. 694-700.
3. Slavatsky S.A. Results of emulsion chamber experiments with very high-energy cosmic rays which are difficult to explain in the framework of the standard model. // Nucl. Phys. B. Proc. Suppl. 2003. V. 122. P.3-11.
4. Амельчаков М.Б. и др. Экспериментальный комплекс НЕВОД / Москва: НИЯУ МИФИ, 2022. 260 с.

Исследование характеристик однопроекционной координатной плоскости мобильного мюонного годоскопа для мюнографии различных объектов

М. Ю. Целиненко, К.Г. Компаниец, С. И. Мирхеев, Н. А. Пасюк, Е. П. Хомчук, В. В. Шутенко, И. И. Яшин

E-mail: MYTselinenko@mephi.ru

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

В настоящее время широкое распространение получил метод мюнографии (по аналогии с рентгенографией) различных природных и естественных объектов таких как: атмосфера и гелиосфера [1], горы и вулканы [2], доменные печи и ядерные реакторы [3], объекты исторического наследия [4]. В основе метода лежит «просвечивание» толстых слоев вещества с помощью естественного потока мюонов космических лучей. Для реализации методики требуется создание прецизионных простых в эксплуатации и надежных мюонных годоскопов.

С этой целью в научно-образовательном центре НЕВОД НИЯУ МИФИ разработан мобильный мюонный годоскоп (ММГ), конструкция которого представляет собой многоканальную детектирующую систему, состоящую из однопроекционных координатных плоскостей (ОКП) площадью около 1м². Каждая ОКП состоит из 96-и тонких и длинных сцинтилляционных стрипов на основе полистирола с добавлением р-терфинила и РОРОР. Сцинтилляторы уложены в два слоя со смещением одного слоя относительно другого на половину ширины стрипа. Светосбор осуществляется с помощью спектросмещающих оптических волокон (файберов) на кремниевые фотоумножители (SiPM). Сигналы с каждого кремниевого фотоумножителя считываются с помощью плат на базе 32-канальной ASIC Retiroc2A (6 плат на одну плоскость). Шесть ОКП собраны в 3 пары с ортогональной ориентацией стрипов и закреплены на общей раме с возможностью ориентации под разными зенитными углами.

Целью данной работы является анализ характеристик однопроекционной координатной плоскости.

Для решения поставленной задачи было проведено тестирование сцинтилляционных стрипов и кремниевых фотоумножителей на специализированных стендах, разработанных в НОЦ НЕВОД [5-6]. Сама ОКП в сборе тестировалась с помощью стенда на базе мюонного годоскопа УРАГАН [7].

Работа выполнена в рамках программы «Приоритет - 2030».

1. Barbashina N.S., Petrukhin A. A., Shutenko V. V. Method of Muonography and Prospects of Its Further Development // Physics of atomic Nuclei. 2021 V. 84, № 6. С. 1182-1194.
2. M. D'Errico et al. The MURAVES muon telescope: a low power consumption muon tracker for muon radiography applications // J.Phys. Conf. Ser. 2022 V. 2374.
3. Yashin et al. Muon Tomography of Large-Scale Objects // Physics of atomic Nuclei. 2021 V. 84, № 6. С. 1171-1181.
4. Procureur, S., Morishima, K., Kuno, M. et al. Precise characterization of a corridor-shaped structure in Khufu's Pyramid by observation of cosmic-ray muons // Nat Commun, 2023, V 14, 1144
5. Yashin I. I. et al. Tests of Elements of the Muon Hodoscope Based on Scintillation Strips with Fiber Light Collection // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics. 2021 V. 85, № 4, 458-460.
6. Астапов И. И. и др. Комплекс для измерения световыхода сцинтилляционных стрипов. Патент РФ № 2794236 С1, 2023.
7. Ampilogov N. V. Application of the URAGAN muon hodoscope to calibrate charged particle detectors // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics. 2015 V. 79, № 3, 386-388.

Методическое оснащение исследовательских станций ускорительного комплекса с источником комптоновского излучения

***А.В. Чуйкина, А.В. Барабанов, В.А. Белов, О.Д. Подгорная, С.Ф. Разиньков, Е.А. Рулева,
В.В. Степашкин, А.В. Щербаков***

E-mail: otd4@expd.vniief.ru

ФГУП «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский национальный исследовательский институт экспериментальной физики», Саров, Россия

В Национальном центре физики и математики (НЦФМ, Саров) создается ускорительный комплекс с источником комптоновского излучения (ИКИ), основанном на обратном комптоновском рассеянии лазерного излучения на релятивистских электронах. ИКИ предназначен для создания квазимонохроматических гамма-квантов в широком диапазоне энергий. Источники данного типа нашли широкое применение в различных областях науки [1]. Целью создания ИКИ является изучение на более высоком уровне свойств ядерной материи и строения вещества.

Экспериментальная программа ИКИ [2] будет охватывать эксперименты по ядерной резонансной флуоресценции (ЯРФ), фотоядерные реакции, фотоделение, физику изомеров, ядерную спектроскопию и др. Эксперименты будут проводиться в нескольких экспериментальных зонах лабораторного здания – исследовательских станциях.

Для решения поставленных задач необходимо с высокой точностью измерять спектры и угловые распределения нейтронов, протонов и гамма-квантов, для чего потребуется использование существующих и разработка новых детекторных систем.

Для решения задач гамма-спектрометрии можно использовать две различных методики – методы онлайн и офлайн гамма-спектрометрии с использованием детекторов из особо чистого германия. Для регистрации нейтронов предполагается использование детекторов на основе ^3He . Для измерения спектров и угловых распределений нейтронов предполагается использование нейтронного времяпролетного детектора на основе быстрого органического сцинтиллятора.

С помощью разработанных детектирующих систем будут получены новые данные по структуре атомных ядер механизмам и кинетике фазовых превращений в материалах при экстремальных условиях, новые методы обнаружения и неразрушающего контроля материалов.

Также на ИКИ планируется разработка спектроскопических систем сверхвысокого энергетического разрешения (не хуже 100 эВ в диапазоне энергий от 20 до 200 кэВ [3]) на основе сверхпроводящих микрокалориметров для прецизионных исследований энергетической структуры атомных ядер, в том числе ядерной изомерии.

1. Gales S., Tanaka K. A., Balabanski D. L. et al. The extreme light infrastructure – nuclear physics (ELI-NP) facility: new horizons in physics with 10 PW ultra-intense lasers and 20 MeV brilliant gamma beams // Reports on Progress in Physics. 2018. V. 81. P. 094301.
2. Сергеев А.М. и др. Проект научной программы ИНОК – комптоновского источника монохроматических гамма-квантов НЦФМ. // Физмат. 2023. V.1. No. 3–4. P. 123–264.
3. Bacrania M. K., Hoover A. S., Karpus P. J. et al. Large-Area Microcalorimeter Detectors for Ultra-High-Resolution X-Ray and Gamma-Ray Spectroscopy, IEEE Transactions on Nuclear Science. 2009. V. 56, No. 4. P. 2299–2302.

Р.А. Шоркин¹

E-mail: roman.shorkin@cern.ch

¹Университет науки и технологий МИСИС

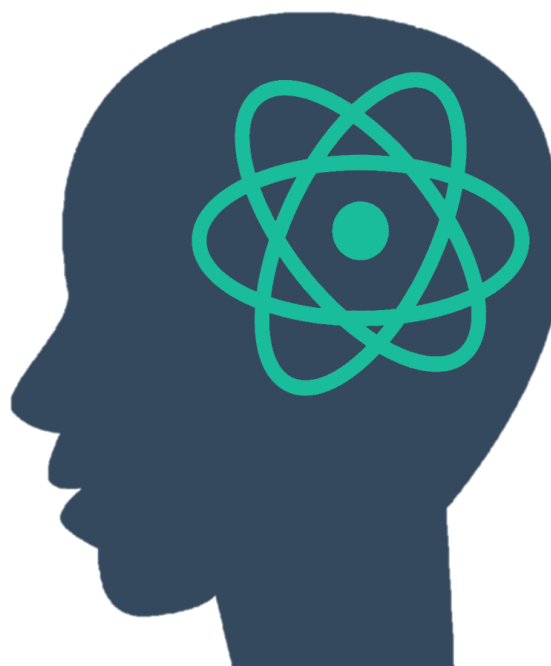
Современные исследования в области физики высоких энергий, в частности анализ физических данных, требуют применения алгоритмов с наибольшей возможной эффективностью. К таковым относятся деревья решений [1] и нейронные сети [2]. Эти алгоритмы машинного обучения широко используются для идентификации частиц [3, 4], отбора сигнальных событий [5, 6], реконструирования событий [7] и для задач триггера [8]. Для большинства исследовательских задач данные классификаторы представляют собой сильные инструменты для отбора сигнала, и, как следствие, увеличения статистической значимости анализа.

Однако, применение методов машинного обучения требует хорошего понимания данных и физической модели, используемой при обучении и оценке классификатора. Любое искусственное различие между настоящими данными и симулированными наборами, используемых при обучении, будет использовано классификатором, что приведет к дополнительной систематической погрешности или неверному толкованию результатов исследования. При этом обеспечение соответствия используемого при обучении набора данных физической действительности может быть затруднительно по ряду причин: несовершенство модели, высокие требования к вычислительным ресурсам для проведения полной симуляции, отсутствие или значительная неопределенность необходимых экспериментальных параметров.

В данной работе исследовалось влияние недостаточного качества определения фона, используемого при обучении и тестировании классификатора, на качество обученных деревьев решений. Рассмотрены случаи с разным уровнем доли ошибочно меченых “фоновых” событий. Исследовано качество деревьев решений, оптимизированных для задач прямого поиска неизвестных частиц.

1. P. Calafiura, D. Rousseau and K. Terao, Artificial Intelligence for High Energy Physics // World Scientific Publishing. 2022
2. B.H. Denby, Neural networks and cellular automata in experimental high-energy physics // Comput. Phys. Commun. 1988. N. 49. P. 429–448.
3. B. P. Roe et al., Boosted decision trees as an alternative to artificial neural networks for particle identification. // Nucl. Instr. Meth. A. 2005. V. 543. P. 577.
4. DELPHI Collaboration (P. Abreu et al.), Classification of the hadronic decays of the Z0 into b and c quark pairs using a neural network // Phys. Lett. B. 1992. V. 295. P. 383–395
5. D0 Collaboration (V.M. Abazov et al.), Evidence for Production of Single Top Quarks and First Direct Measurement of $|V_{tb}|$ // Phys. Rev. Lett.. 2007. V. 98. P. 181802.
6. CMS Collaboration (A. Hayrapetyan et al.), Search for long-lived heavy neutrinos in the decays of B mesons produced in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV // J. High Energ. Phys.. 2024. V. 2024.
7. ATLAS Collaboration (G. Aad et al.), A neural network clustering algorithm for the ATLAS silicon pixel detector // JINST. 2014. V. 9. P09009
8. L. Lonnblad, C. Peterson, T. Rognvaldsson, Finding gluon jets with a neural trigger // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P. 1321–1324

Теоретическая физика



Эффект ядерной деформации в многозарядных ионах в модели двухпараметрического распределения Ферми

Д.С. Акулов, Д.А. Глазов

E-mail: dmitriy.akulov@metalab.ifmo.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО», Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время происходит стремительное увеличение точности спектроскопических измерений, что приводит к необходимости проведения более прецизионных теоретических предсказаний. Более высокая точность теоретических расчетов, в свою очередь, требует оценки различных эффектов высшего порядка, в том числе таких как эффект ядерной деформации.

В настоящей работе найдено аналитическое выражение для определения величины поправки на ядерную деформацию к энергии связи электрона в водородоподобных многозарядных ионах. Поправка на эффект ядерной деформации была получена как разность между поправками на конечный размер ядра в случае деформированного ядра в модели Ферми и недеформированного ядра также в модели Ферми. Рассматривая данную разницу в рамках обычной теории возмущений, рассматриваемая поправка может быть найдена как сумма ряда по ядерным моментам с некоторыми коэффициентами [1]. Искомые коэффициенты не зависят от вида потенциала электрического поля, создаваемого ядром, а определяются граничными условиями на волновые функции на ядерной поверхности. Предполагая, что волновые функции в случае модели Ферми слабо отличаются от волновых функций в случае модели равномерно заряженного шара, данные коэффициенты могут быть найдены с помощью формализма развитого для модели равномерно заряженного шара [1].

В работе приведены расчеты с помощью полученной аналитической формулы для ряда деформированных ядер, а также их сравнение с предыдущим аналитическим результатом [2] и численным расчетом. Точность расчета в сравнении с [2] увеличилась, так как в настоящей работе начальным приближением теории возмущений выбрана модель недеформированного Ферми, в сравнении с моделью равномерно заряженного шара в [2].

1. V. M. Shabaev, Finite nuclear size corrections to the energy levels of the multicharged ions, 1993 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 26 1103
2. Y. S. Kozhedub et al., Nuclear deformation effect on the binding energies in heavy ions, Phys. Rev. A 77, 032501

Квантовохимическое исследование механизма сборки пиразолов из фенилальдазина и фенилацетилена в суперосновной среде NaOBu^t/DMSO*Г.Р. Гнатовский^{1,2}, В.Б. Орел¹*

E-mail: gnat140299@yandex.ru

¹Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия²Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия

Установлен механизм экспериментально наблюдаемой [1] сборки 4-бензилпиразола (47%) и 1-бензилпиразола (8%) из фенилальдазина (Ph–CH=N–N=CH–Ph) и фенилацетилена (HC≡C–Ph) в суперосновной среде NaOBu^t/DMSO при небольшой температуре (20–22°C). Данная реакция имеет важное практическое значение, поскольку открывает доступ к получению различных пиразольных структур, обладающих целым рядом биологически-активных свойств [2]. Все расчёты выполнялись в рамках метода B2PLYP-D2/6-311+G**//B3LYP/6-31+G* с учётом сольватационных эффектов растворителя (ДМСО) на уровне континуальной модели IEF PCM.

Показано, что на первой стадии сборки происходит присоединение фенилэтинида по одной из C=N связей фенилальдазина с активационным барьером $\Delta G^\ddagger = 15.6$ ккал/моль. Причем участие молекулы NOBu^t, координированной по атому азота диазааллильной группы, понижает активационный барьер этой стадии до $\Delta G^\ddagger = 12.9$ ккал/моль. В результате, образуется комплекс аниона пропаргилгидраза и NOBu^t с понижением энергии системы на $\Delta G = -14.4$ ккал/моль. Дальнейшая сборка 4-бензилпиразола из этого комплекса осуществляется через три основные стадии: протонирование азааниона пропаргилгидраза ($\Delta G^\ddagger = 0.0$ ккал/моль), ацетилен-алленовую изомеризацию пропаргилгидраза в *N*-алленилгидразон ($\Delta G^\ddagger = 16.8$ ккал/моль) и циклизацию аниона *N*-алленилгидраза в 4-бензилпиразол ($\Delta G^\ddagger = 8.6$ ккал/моль). Причем возможная циклизация аниона пропаргилгидраза ($\Delta G^\ddagger = 17.6$ ккал/моль) оказывается кинетически менее выгодной на $\Delta\Delta G^\ddagger = 0.8$ ккал/моль, чем его изомеризация в алленовый интермедиат. В результате образование 4-бензилпиразола происходит с понижением энергии системы на $\Delta G = -61.9$ ккал/моль относительно исходных фенилальдазина и фенилацетилена и лимитирующей стадией его сборки является ацетилен-алленовая изомеризация. Отметим, что депротонирование 4-бензилпиразола трет-бутилатом приводит к более устойчивой в суперосновной среде анионной форме 4-бензилпиразола ($\Delta G = -84.6$ ккал/моль).

Сборка побочного 1-бензилпиразола из аниона пропаргилгидраза происходит с понижением энергии системы на $\Delta G = -58.1$ ккал/моль и включает три стадии: протонирование карбаниона пропаргилгидраза ($\Delta G^\ddagger = 21.6$ ккал/моль), депротонирование СН-группы пропаргилового фрагмента ($\Delta G^\ddagger = 0.0$ ккал/моль) и циклизацию аниона ацетиленового гидраза в 1-бензилпиразол ($\Delta G^\ddagger = 12.4$ ккал/моль). Здесь, лимитирующей стадией является протонирование карбаниона пропаргилгидраза.

Образование 4-бензилпиразола кинетически на $\Delta\Delta G^\ddagger = 4.8$ ккал/моль и термодинамически на $\Delta\Delta G = 3.8$ ккал/моль выгоднее, чем образование 1-бензилпиразола, что объясняет экспериментально полученные соотношения выходов 4-бензилпиразола (47%) и 1-бензилпиразола (8%).

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ FZZE-2024-0002 и при финансовой поддержке гранта Иркутского института химии им. А.Е. Фаворского СО РАН для молодых учёных.

1. Bidusenko I.A. et al. The reaction of acetylenes with aldazines in the NaOBu^t/DMSO system: a contribution to the pyrazole chemistry // *Mendeleev Communications*. 2024. V. 34. No 1. P. 110–112.
2. Faria J.V. et al. Recently reported biological activities of pyrazole compounds // *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. 2017. V. 25. No. 21. P. 5891–5903.

Ренормгрупповое исследование составных операторов в теории ϕ^4

Д.А. Давлетбаева^{1,2}, М.Ю. Налимов^{1,3}

E-mail: st064737@student.spbu.ru

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Составные операторы – удобный инструмент для анализа критического поведения ИК-несущественных параметров систем [1]. Например, с их помощью может быть исследовано распространение звука в критической среде [2], получены критические размерности скорости и вязкости при сверхтекучем фазовом переходе [3], а также другие величины, не описываемые исходным ИК-эффективным действием модели.

В работе обсуждается использование составных операторов в модели ϕ^4 , особенности ренормировки и вычисления критических размерностей. В дополнение к этому, обсуждается использование асимптотики высоких порядков для дальнейшего пересуммирования по Борелю для улучшения сходимости рядов. Представлены результаты проведённых вычислений и примеры приложения составных операторов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075–15–2022–287 от 06.04.2022).

1. Васильев А. Н., Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. Санкт-Петербург: Издательство Петербургского института ядерной физики (ПИЯФ), 1998. 773 с.
2. Аджемян Л. Ц., Васильев А. Н. Н-модель критической динамики: выбор динамических переменных, исключение звуковых мод, уравнения для звуковых волн вблизи ТС // Теоретическая и математическая физика. 1998. Т. 117, № 1. С. 140–160.
3. Давлетбаева Д. А., Гнатич М., Комарова М. В., Лучивянки Т., Мижишин Л., Налимов М. Ю. Составные операторы стохастической модели А // Теоретическая и математическая физика. 2023. Т. 216, № 3. С. 519–531.

Структура и динамика вихрей в сверхпроводящих пленках с сильным спин-орбитальным взаимодействием

Д.В.Захаров¹, А.Я.Кудлис¹

E-mail: dmitrii.zakharov@metalab.ifmo.ru

¹ *Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

Взаимодействие между сильной спин-орбитальной связью (SOC) и ферромагнитным (F) упорядочением спинов электронов в сверхпроводящих системах привлекает большое внимание, поскольку оно вызывает множество интересных явлений, включая появление граничные состояний Майорана [1], джозефсоновские ϕ_0 -переходы [2], спиральные состояния со спонтанными электрическими токами [3]. Спин-орбитальная связь и обменное поле (или внешнее магнитное поле) нарушают пространственную симметрию и T-симметрию. Нарушение пространственной симметрии может быть описано вектором $[n \times h]$. Спин-орбитальное взаимодействие (SOI) на границе раздела S /F может быть включено в плотность свободной энергии Гинзбурга–Ландау в качестве дополнительных слагаемых, соответствующих нечетным степеням оператора $D = -i\partial - (2e/hc) A$:

$$F = -\alpha|\psi|^2 + 0.5\beta|\psi|^4 + \xi^2\alpha_0|D\psi|^2 + (\varepsilon_1 \psi^*[n \times h]D\psi + \varepsilon_3 D\psi^*[n \times h]D^2\psi + \text{c.c.})$$

Феноменологические параметры ε_1 и ε_3 соответствуют спин-орбитальному взаимодействию. Спин-орбитальная связь приводит к образованию геликоидального основного состояния с неоднородным вектором q , а основное состояние описывается параметром порядка $\psi = |\psi|e^{iqr}$ [4]. Эта форма свободной энергии обеспечивает спонтанный сверхпроводящий ток и спонтанное магнитное поле, а также свойства невзаимного переноса [3]. В рамках данной работы исследуется взаимодействие вихревого ядра и вихрей в тонкой сверхпроводящей пленке, помещенной на ферромагнитный изолятор с однородным обменным полем h и со спин-орбитальной связью на границе раздела сверхпроводник/ферромагнетик (S/F).

Основным методом исследования является математическое моделирование с численным решением временного уравнения Гинзбурга–Ландау. Моделирование базируется на использовании библиотеки pyTDGL [5], с включением нечетных степеней оператора D . На основе моделирования была получена картина смещения вихревого ядра в зависимости от размера пленки d . Также с помощью теории возмущений выполнена оценка тока сверхпроводимости одиночного вихря и силы взаимодействия отдельных вихрей с учетом влияния ферромагнитного изолятора.

Авторы выражают благодарность университету ИТМО за поддержку данного исследования.

1. Jason Alicea, New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems, Rep. Prog. Phys. 75, 076501 (2012).
2. D. B. Szombati, S. Nadj-Perge, D. Car, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, Josephson ϕ_0 -junction in nanowire quantum dots, Nat. Phys. 12, 568 (2016).
3. Zh. Devizorova, A. V. Putilov, I. Chaykin, S. Mironov, and A.I. Buzdin, Phase transitions in superconductor/ferromagnet bilayer driven by spontaneous supercurrents, Phys. Rev. B 103, 064504 (2021).
4. V. P. Mineev and K. V. Samokhin, Helical phases in superconductors, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 105, 747-763 (March 1994)
5. Logan Bishop-Van Horna, pyTDGL: Time-dependent Ginzburg-Landau in Python, Computer Physics Communications, Volume 291, October 2023, 108799

Perturbative analysis of a five-parameter symmetrical teleparallel gravitational theory generalization

S.A. Klimova², V.P. Vandeev¹, A.N. Semenova¹.

E-mail: unicorno2003@mail.ru

¹ *B.P. Konstantinov St. Petersburg Institute of Nuclear Physics, Kurchatov Institute, Gatchina, Russia*

² *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia*

The general theory of relativity presented [1] in 1915 became a revolution in theoretical physics due to the beauty of its formulation and the universality of its applicability to the physics of gravitational and cosmological phenomena. However, along with the huge successes, the general theory of relativity has a number of cosmological problems primarily related to the need to introduce dark energy and dark matter into the theory, the presence of which as some hidden mass [2] is necessary when describing the evolution of the universe and the behavior of its large-scale structures. Therefore, it is quite natural to raise the question of the possibility of constructing a theory other than Einstein's theory of relativity, which would be consistent with it in reliably verified aspects but at the same time would adequately describe those phenomena that are within the framework of GRT requires the introduction of additional dark sectors, or requires fine-tuning of the initial data.

That is why we study the properties of vacuum equations of motion in a linear approximation of perturbation theory over a Minkowski plane space. This issue was first considered within the NGR framework in [3], where the authors distinguished the symmetric and antisymmetric parts of the perturbations. Applying the methods of perturbation theory from [4], we obtain a system of linear equations from which we establish which degrees of freedom are dynamic which are gauge and which are limited by connections. Dynamic modes will be called variables whose behavior is uniquely determined by the initial conditions of the Cauchy problem related to (limited) — those whose description does not require initial data at all and calibration — “superfluous” variables, the freedom of choice of which does not affect the evolution of a dynamical system, as a rule, such variables will be those that have fallen out of the linear equations of motion.

Using perturbations of the equations of motion near the background solution, the flat Minkowski space, we investigate linearized field equations in scalar, vector and tensor sectors of variables. This allows us to classify the variables of the theory in each of the NGR implementations and identify the most adequate models that do not contradict GRT in the first order of smallness. These include both the case of the one - parameter NGR and the general position model with additional restrictions on parameters that exclude the occurrence of brass mods. We also indicated two models in which metric variables behave in a linear order of smallness similar to GRT.

1. Einstein, A. Die Feldgleichungen der Gravitation / A. Einstein // Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin. — 1915. — Pp. 844–847.
2. Zwicky, F. On the masses of Nebulae and of Clusters of Nebulae / F. Zwicky // The Astrophysical Journal — 1937. — Vol. 86. — Pp. 217-246.
3. Fukui, M. Weak Field Approximation of New General Relativity / M. Fukui, M. Masukawa // Progress of Theoretical Physics — 1985. — Vol. 73, Iss. 4. — Pp. 973–978.
4. Golovnev, A. Gravitational waves in New General Relativity / A. Golovnev, A. N. Semenova and V. P. Vandeev. // Journal of Cosmology and Astroparticle Physics — 2024. — Vol. 01, no 003

Применение теории коррелированных случайных матриц для изучения неаффинных деформаций в аморфных телах

Д.А. Коных¹, Д.В. Бабин^{1,2}, Я.М. Бельтюков¹

E-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время не ослабевает интерес к изучению природы аморфного состояния вещества и его микроскопической структуры. При этом свойства колебательных возбуждений и локальные упругие свойства аморфных материалов являются предметом активного исследования [1, 2]. Данные свойства определяют такие макроскопические явления, как теплоемкость, теплопроводность и распространение фононов в аморфных полупроводниках и диэлектриках.

Вследствие неупорядоченности структуры в аморфных твердых телах проявляется существенная неаффинность (неоднородность) атомных смещений, возникающих под действием однородного внешнего механического воздействия. Масштаб неаффинных деформаций зависит от природы аморфного вещества и в разных материалах оценивается десятками межатомных расстояний. На масштабе неаффинности классическая макроскопическая теория упругости неприменима, что делает исследования неаффинных деформаций привлекательными с теоретической стороны.

Для описания аморфного состояния может применяться современная теория коррелированных случайных матриц. Колебания вблизи устойчивого положения равновесия описываются динамической матрицей M , и в случае сильного беспорядка, присущего аморфным телам, статистические свойства динамической матрицы наилучшим образом описываются коррелированным ансамблем Вишарта $M = AA^T$. При этом для описания структурного беспорядка элементы матрицы A являются случайными числами. Однако при этом они могут быть скоррелированы между собой, и в общем виде парные ковариации матричных элементов описываются матрицей с четырьмя индексами. Вследствие наличия в аморфных телах только ближайшего взаимодействия между атомами, в отличие от дальнего беспорядка в кристаллах, матрица ковариаций имеет сильно-разреженную, но до некоторой степени определенную структуру. Данная модель коррелированного ансамбля Вишарта была применена нами ранее для описания критерия Иоффе-Регеля между фононами и диффузионным типом колебаний, которые дают высокочастотный вклад в так называемый бозонный пик [3, 4]. Теперь данная теория применяется нами для описания структурных корреляционных свойств неаффинных деформаций.

В рамках данной работы исследовались корреляции между пространственными производными неаффинных деформаций, соответствующих корреляциям между локальными флуктуациями плотности вещества (корреляторы дивергенции неаффинных смещений) и между его локальными вращениями (корреляторы ротора неаффинных смещений). Показано, что такие корреляции имеют две компоненты: дельта-образный вклад, соответствующий белому шуму, и экспоненциально спадающую компоненту с отрицательной корреляцией, масштаб которой определяется неоднородностью среды. Полученный масштаб неаффинности увеличивается с ростом модельного беспорядка и оказывается сопоставим с масштабом Иоффе-Регеля. Найденные теоретические результаты были подтверждены с помощью молекулярно-динамических расчетов для разных аморфных структур.

1. Zhou W.X. et al. // *Advanced Functional Materials*. 2020. Т. 30. №. 8. С. 1903829.
2. Hu Y.C., Tanaka H. // *Nature Physics*. 2022. Т. 18. №. 6. С. 669-677.
3. Beltukov Y.M., Kozub V.I., Parshin D.A. // *Physical Review B*. 2013. Т. 87. №. 13. С. 134203.
4. Conyuh D.A., Beltukov Y.M. // *Physical Review B*. 2021. Т. 103. №. 10. С. 104204.

Исследование магнитного квадрупольного момента ядра ^{175}Lu и P, T-нечетной степени поляризации уровней в катионе $^{175}\text{LuOH}^+$.

И.П. Курчавов¹, А.Н. Петров^{1,2}

E-mail: kurchavov_ip@npri.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона и магнитных квадрупольных моментов (МКМ) ядер, особенно в трехатомных молекулах, таких как LuOH^+ [1], открывает новые перспективы в исследованиях за пределами стандартной модели, объединяющей электромагнитные, слабые и сильные взаимодействия. Эти молекулы, охлаждаемые лазером, чувствительны к T, P-нарушающим взаимодействиям. В рамках данной работы использовался усовершенствованный метод расчета степени поляризации молекул для исследования вкладов ЭДМ и МКМ.

Расчеты, выполненные для молекулы $^{175}\text{LuOH}^+$ [2] со спином ядра лютеция $I = 7/2$, показали, что вклад МКМ может значительно варьироваться в зависимости от внешнего электрического поля. Степень поляризации уровней оказалась менее $P_e < 0.58$ для ЭДМ и $P_M < 0.12$ для МКМ для большинства состояний молекулы, что практически аналогично результатам, ранее полученным для молекулы YbOH [3]. Это ограничение связано с особенностями структуры l-удвоения линейных трехатомных молекул, для которых насыщение поляризации при больших внешних полях не достигает 100%.

Также впервые было учтено продольное колебание, и оно приводит к уменьшению значений степени поляризации для ЭДМ электрона и МКМ ядра примерно на 4-5% при электрическом поле $E = 50\text{-}100$ В/см.

Результаты исследований показывают, что применение данных расчетов может улучшить точность экспериментов, направленных на измерение МКМ и ЭДМ. Эти эксперименты помогут глубже понять T, P-нарушающие взаимодействия и расширить представления о свойствах элементарных частиц, таких как кварки и нуклоны [4].

1. Daniel E. Maison, Leonid V. Skripnikov, Gleb Penyazkov, Matt Grau, and Alexander N. Petrov T,P-odd effects in the LuOH^+ cation // Phys. Rev. A 106, 062827 (2022)
2. I. Kurchavov, D. Maison, L. Skripnikov, M. Grau, and A. Petrov, Nuclear magnetic quadrupole moment of ^{175}Lu and parity-violating polarization degree of levels in $^{175}\text{LuOH}^+$ // Phys. Rev. A 108, 052815 (2023)
3. I. Kurchavov, A. Petrov P, T-odd energy shifts of the $^{173}\text{YbOH}$ molecule // Phys. Rev. A 106, 062806
4. L. V. Skripnikov, A. N. Petrov, A. V. Titov, and V. V. Flambaum CP-Violating Effect of the Th Nuclear Magnetic Quadrupole Moment: Accurate Many-Body Study of ThO // Phys. Rev. Lett. 113, 263006

Viscosity in an accelerated relativistic medium from the Unruh effect vs string theory bound***D.D. Lapygin¹, G.Y. Prokhorov²***

E-mail: dmitrijlapygin@gmail.com

¹*Southern Federal university, Rostov-on-Don, Russia*²*Joint Institute for Nuclear Research, Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Dubna, Russia*

This project investigates the dissipative properties of an accelerated relativistic medium and their connection to the Unruh effect and effective black hole radiation. The thermodynamic properties in spaces with a horizon is one of the most discussed in modern fundamental physics. A notable 2005 string theory limit sets a minimum shear viscosity.

The aim of the work is to investigate issues related to entropy and viscosity in appropriate media, in particular, to verify the viscosity constraint from string theory. Formula, obtained in [1].

We calculated viscosity in an accelerated frame for a photon medium, where no holographic description exists, treating the black hole horizon as a membrane of finite thickness [2]. While the average viscosity meets the string theory limit, local values are described by a universal function that is independent of particle spin. Specifically, on the membrane surface, the ratio of local viscosity to local entropy is half the string theory limit. Importantly, this result is gauge-independent, with the positive contribution from gauge fixing exactly canceling the negative contribution from Faddeev-Popov ghosts.

1. The viscosity of photons in an accelerated reference frame at the Unruh temperature was calculated for the first time.

2. The ratio of the average viscosity to the average entropy for photons in a Minkowski vacuum in an accelerated medium has been clearly shown. This value is equal to $1/4\pi$, which corresponds to the limit derived from string theory.

3. It is shown that the ratio of local viscosity to local entropy on the membrane surface is two times less than the limit from string theory and is equal to $1/8\pi$.

4. The ratio of local viscosity to local entropy is found at an arbitrary distance from the membrane of the extended horizon for photons. It is clearly shown that this function is universal for massless particles with different spins.

5. Various approaches to calculating entropy are analyzed and it is shown that the thermodynamic definition through the pressure derivative is in agreement with the limit on the ratio of viscosity to entropy from string theory.

6. It is clearly shown that the viscosity of photons does not depend on the choice of gauge and there is a mutual compensation of the contributions of the members fixing the gauge and the Faddeev-Popov ghosts. Thus, all the tasks were completed.

This work for a scalar massless field has already been done in [3]. However, such a solution remains not obvious for other types of fields, due to the different values of entropy. We performed a calculation for a vector massless field using the Kubo formula, where we used the average value of the correlator of two energy-momentum tensors, and also used the point-splitting technique to eliminate uncertainties. In the end, we also turned to the theory of functions of complex variables, using Cauchy's theorem for residues. We also separately counted contributions from Maxwell's, gauge's, and ghost's tensor members to show their role in the calculations.

1. D.T. Son. "Hydrodynamics and gauge/gravity duality". In: (2009). doi: 10.1016/j.nuclphysbps.2009.07.048. eprint: 1005.0475.
2. Wilczek F. Parikh M. K. "An action for black hole membranes". In: Physical Review D (1998). doi: 10.1103/physrevd.58.064011.
3. G. Chirco. "The universal viscosity to entropy density ratio from entanglement". In: (2010). doi:10.1103/PhysRevD.82.024010. eprint: 1005.0475.

Интерфейс между квантовохимическими программами PySCF и GeCCo для высокоточных расчётов многоконфигурационными методами связанных кластеров

Лосев М.И.^{1,2}, Олейниченко А.В.^{1,2}, Зайцевский А.В.^{1,3}

E-mail: losev.mi@phystech.su

¹НИИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, г. Гатчина

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Многоконфигурационные методы связанных кластеров [1] (MRCC) являются мощным инструментом для точного описания электронных состояний атомов и молекул со сложной композицией волновых функций. В частности, метод связанных кластеров с многодетерминантным вакуумом (ic-MRCC, internally contracted MRCC), долгое время не имевший практических приложений из-за сложности амплитудных уравнений, практическое решение которых невозможно без автоматической генерации кода, был успешно реализован в открытом программном обеспечении GeCCo [2]. Однако использование GeCCo может быть затруднено, так как в нем не реализованы методы среднего поля и генерация молекулярных интегралов, необходимых для расчётов методом ic-MRCC. В представленной работе решена проблема генерации этих интегралов с помощью квантовохимического пакета PySCF [3] и передача в программу GeCCo для выполнения расчетов методом ic-MRCC. Пакет PySCF был выбран как современное ПО с открытым исходным кодом, имеющее множество инструментов, включая метод CASSCF, а также возможность усреднения по спину и симметрии, что делает его оптимальным выбором для решения поставленной задачи.

Новый модуль, `pyscf2gecco`, разработанный на языке Python, позволяет автоматизировать процесс получения и обработки молекулярных интегралов, начиная с расчетов методом CASSCF в PySCF и заканчивая экспортом данных в GeCCo. Среди возможностей нового пакета: заморозка орбиталей, сортировка молекулярных орбиталей по неприводимым представлениям группы симметрии, а также преобразование полученных интегралов в формат, который может быть прочитан программой GeCCo для последующего использования в расчетах методом ic-MRCC. Все это делает модуль `pyscf2gecco` полезным инструментом прецизионного моделирования систем с большим количеством открытых оболочек.

1. Köhn A. [et al.]. State-specific multireference coupled-cluster theory // Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 2013. V. 3(2). P. 176-197.
2. Hanauer M., Köhn A. Pilot applications of internally contracted multireference coupled cluster theory, and how to choose the cluster operator properly // J. Chem. Phys. 2011. – V. 134(20): 204111.
3. Sun Q. [et al.]. Recent developments in the PySCF program package // J. Chem. Phys. 2020. V. 153(2): 024109.

Общие свойства уравнений движения в классе симметричных телепараллельных теорий гравитации

Р.И. Максютов^{1,2}

E-mail: RamazanMaksyutov@yandex.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время активно развивается целое множество различных модификаций теории гравитации. Это связано с трудностями при описании ряда явлений, наблюдаемых во Вселенной. Среди таких вопросов стоит выделить наличие тёмной материи и тёмной энергии, влияние которых на эволюцию Вселенной и имеющихся в ней структур в последние десятилетия стало очевидным; построение последовательной теории, объясняющей эволюцию Вселенной в первые моменты её существования; а также построение согласованной квантовой теории гравитации.

Одним из путей модификации является симметричная телепараллельная теория гравитации (STG – Symmetric Teleparallel Gravity), которая получила значительный толчок в развитии в последнее время.

Данное исследование основывается на подходах и методах, представленных в работах [1-4]. Авторы данных работ рассматривают общий формализм симметричных телепараллельных теорий гравитации и конкретные его приложения к космологическим моделям. Представленная работа направлена на исследование уравнений движения в классе симметричных телепараллельных теорий гравитации, на уточнение процедуры их вывода и на анализ их приложения в наиболее важных частных случаях.

В ходе проведённой работы посредством вариационного принципа была произведена процедура вывода уравнений движения в классе симметричных телепараллельных теорий гравитации. Было выявлено, что при определённых значениях произвольных параметров действия данная теория воспроизводит результаты общей теории относительности. Кроме того, было изучено приложение двух частных случаев из данного класса теорий к задаче с пространственно плоской, однородной и изотропной Вселенной. Наконец, была уточнена природа математического объекта, активно используемого в литературе, структура которого, тем не менее, не обсуждалась достаточно подробно. Некоторые результаты данной работы представлены в [5].

Среди дальнейших направлений исследования стоит выделить анализ двух подходов к построению действия данного класса теорий: с помощью множителей Лагранжа, обусловленных наложенными на переменные связями, или без данных множителей, но с учётом связей в явной форме прямо в действии и ограничением класса варьируемых функций. Интерес представляет выяснение эквивалентности данных подходов с точки зрения динамики системы.

1. Beltrán Jiménez J., Heisenberg L., Koivisto T. S. The geometrical trinity of gravity // Universe. 2019. T. 5. №. 7. С. 173.
2. Heisenberg L. A systematic approach to generalisations of General Relativity and their cosmological implications // Physics Reports. 2019. T. 796. С. 1-113.
3. Jiménez J. B., Heisenberg L., Koivisto T. Coincident general relativity // Physical Review D. 2018. T. 98. №. 4. С. 044048.
4. Jiménez J. B., Heisenberg L., Koivisto T. S. Teleparallel palatini theories // Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. 2018. T. 2018. №. 08. С. 039.
5. Blixt D., Golovnev A., Guzman M.-J., Maksyutov R. Geometry and covariance of symmetric teleparallel theories of gravity // Physical Review D. 2024. T. 109. №. 4. С. 044061.

Квантовохимическое моделирование реакции образования диспирокетала из 2-метилциклогексанона и фенилацетилена в суперосновной среде KOH/DMSO

А. А. Манжуева, В. Б. Орел

E-mail: manana@cc.isu.ru

Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия

Взаимодействие циклогексанона с фенилацетиленом при 80°C в среде KOH/DMSO приводит не только к α,β - и β,γ -ненасыщенным кетонам по реакции C-винилирования, но и к диспирокеталам, сборка которых инициируется реакцией этинилирования с образованием алкоголят-иона [1]. Механизм сборки 15-[(Z)-фенилметилен]-7,14-диоксадиспиро[5.1.5.2]-пентадекана из циклогексанона и фенилацетилена был нами ранее исследован [2]. Главное отличие от незамещенного циклогексанона заключается в том, что в случае 2-метилциклогексанона образуется смесь диастереомеров, а также региоизомеров диспирокетала с различными взаимными ориентациями метильных групп.

Для выявления причин нарушения стереоселективности проведено теоретическое B2PLYP-D2/6-311+G**//B3LYP/6-31+G* исследование сборки диспирокетала из 2-метилциклогексанона и фенилацетилена с детальным конформационным и изомерным анализом продуктов, интермедиатов и переходных состояний на каждой стадии реакции.

В наиболее выгодном конформере исходного 2-метилциклогексанона метильная группа занимает экваториальное положение. Присоединение фенилэтинид-иона по карбонильной группе экваториального 2-метилциклогексанона запускает сборку диспирокетала и может приводить к образованию алкоголят-иона (реакция этинилирования Фаворского) как с аксиальным, так и с экваториальным положением этинильной группы. В случае аксиальной ориентации это превращение связано с активационным барьером $\Delta G^\ddagger = 12,8$ ккал/моль и понижением энергии на $\Delta G = -2,6$ ккал/моль. Дальнейшее присоединение образовавшегося алкоголят-иона по карбонильной группе второй молекулы кетона приводит к аниону полукетала с $\Delta G^\ddagger = 7,7$ ккал/моль и повышению энергии на $\Delta G = 4,3$ ккал/моль. Завершает сборку диспирокетала внутримолекулярное присоединение O-аниона по тройной C \equiv C связи полукетала с суммарным активационным барьером $\Delta G^\ddagger = 16,2$ ккал/моль, отсчитанным относительно циклогексанона и алкоголят-иона. В результате образуется E-карбанион диспирокетала, который после протонирования молекулой воды переходит в Z-изомер диспирокетала с понижением энергии системы на $\Delta G = -15,9$ ккал/моль, относительно фенилацетилена и двух молекул циклогексанона. Описанный выше путь является кинетически более предпочтительным и приводит к SSSS-изомеру диспирокетала. С другой стороны, диссоциация аксиального алкоголят-иона ($\Delta G^\ddagger = 15,4$ ккал/моль) с последующим присоединением фенилэтинид-иона в экваториальное положение ($\Delta G^\ddagger = 13,3$ ккал/моль, $\Delta G = -1,2$ ккал/моль) будет приводить через циклизацию ($\Delta G^\ddagger = 15,7$ ккал/моль, $\Delta G = -19,5$ ккал/моль) к термодинамически более устойчивому RSSR-изомеру.

Квантовохимические исследования показали, что стереоселективность реакции нарушается из-за невысоких прямого и обратного барьеров стадии этинилирования, которые обеспечивают возможность перехода стереоизомеров друг в друга.

Исследование проведено при финансовой поддержке госзадания Минобрнауки РФ №FZZE-2024-0002 и гранта Иркутского государственного университета для молодых учёных №091-24-307 «Квантовохимическое моделирование реакции образования диспирокетала из 2-метилциклогексанона и фенилацетилена в суперосновной среде KOH/DMSO».

1. Schmidt E. Yu., et al. 15-[(Z)-Phenylmethylidene]-7,14-dioxadispiro[5.1.5.2]pentadecanes: stereoselective one-pot assembly from cyclohexanones and phenylacetylene in a KOH/DMSO suspension // Tetrahedron letters. 2011. № 29. P. 3772–3775.
2. Орел В.Б., Манжуева А.А. Механизм одnoreакторной стереоселективной сборки спирокеталевых производных из циклогексанона и фенилацетилена в среде KOH/DMCO: квантовохимическое исследование // Химическая физика. 2023. Т. 42, № 7, С. 59–69.

Relativistic expansion for correlation corrections to the g factor of highly charged ions*A.D. Moshkin^{1,2}, D.A. Glazov², V.A. Malyshev^{1,3}, A.V. Volotka², D.V. Zinenko¹*

E-mail: st086491@student.spbu.ru

¹*Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia*²*School of Physics and Engineering, Saint Petersburg, Russia*³*Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute», Gatchina, Russia*

High-precision measurements of the g factor of highly charged ions provide an unprecedented test of bound-state QED [1-3]. Currently, the experimental accuracy for highly charged ions has reached the level of 10^{-9} — 10^{-11} [4-8]. Specifically, these studies led to the most accurate value of the electron mass [9,10]. Further development of the theory and experiments with the g factor opens up the possibility for the independent determination of the fine-structure constant, the nuclear parameters and the search for new physics [11-13]. Recently, the g factor of the ground state of boron-like argon was measured at the Max Planck Institute during the ALPHATRAP project with accuracy of 10^{-9} and the results are in agreement with theoretical predictions [7]. Future experiments with heavier ions with different numbers of electrons are planned as part of this project.

This work investigates correlation effects at small values of the nuclear charge for the Coulomb and various screening potentials. The first-order contribution was considered within the framework of the strict QED approach and higher orders in the Breit approximation. A power expansion in the αZ parameter was then performed for lithium-like ions in the ground $(1s)^2$ and excited $(1s)^2 2p_{1/2}$ and $(1s)^2 2p_{3/2}$ states. In combination with high precision non-relativistic calculations, this will improve the accuracy of the theoretical values.

1. Häffner H. et al. High-Accuracy Measurement of the Magnetic Moment Anomaly of the Electron Bound in Hydrogenlike Carbon // *Phys. Ref. Lett.* 2000, 85, 5308.
2. Sturm S. et al. g factor measurements of hydrogenlike $20\text{Si}13+$ as a challenge to QED calculations // *Phys. Ref. A.* 2013, 107, 023002.
3. Shabaev V.M. et al. Theory of Bound-Electron g factor in Highly Charged Ions // *J. Phys. Chem. Ref. Data* 2019, 44, 031205.
4. Sturm S. et al. g factor of Hydrogenlike $20\text{Si}13+$ // *Phys. Rev. Lett.* 2011, 107, 023002.
5. Wagner A. et al. g factor of lithiumlike silicon $20\text{Si}13+$ // *Phys. Rev. Lett.* 2013, 110, 033003.
6. Köhler F. et al. Isotope dependence of the Zeeman effect in lithium-like calcium // *Nat. Commun.* 2016, 7, 10246.
7. Arapoglou I. et al. The g factor of Boronlike Argon $40\text{Ar}13+$ // *Phys. Rev. Lett.* 2019, 122, 253001.
8. Glazov D.A. et al. g factor of Lithiumlike Silicon: New Challenge to Bound-State QED // *Phys. Rev. Lett.* 2019, 123, 173001.
9. Sturm S. et al. High-precision measurement of the atomic mass of the electron // *Nature* 2014, 506, 467.
10. Tiesinga E. et al. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2018. // *Rev. Mod. Phys.* 2021, 93, 025010.
11. Shabaev V.M. et al. g factor of Heavy Ions: A New Access to the Fine Structure Constant // *Phys. Rev. Lett.* 2006, 96, 253002.
12. Yerokhin V.A. et al. g factor of Light Ions for an Improved Determination of the Fine-Structure Constant // *Phys. Rev. Lett.* 2016, 116, 100801.
13. Debierre V. et al. Testing standard-model extensions with isotope shifts in few-electron ions // *Phys. Rev. A* 2022, 106, 062801.
14. Yerokhin V.A. et al. Two-photon-exchange corrections to the g factor of Li-like ions // *Phys. Rev. A* 2021, 104, 022814.

Вычисление матриц плотности в релятивистском методе связанных кластеров и построение компактных базисных наборов

А.В. Олейниченко^{1,2}, А.В. Зайцевский^{1,3}, Л.В. Скрипников^{1,4}, Э. Элиав⁵

E-mail: oleynichenko_av@npri.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия

³Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

⁵Тель-Авивский университет, Тель-Авив, Израиль

Разработка эффективных подходов к расчёту приведённых матриц плотности методом связанных кластеров для многомерного модельного пространства открывает возможности вычисления средних и переходных значений операторов свойств, визуализации электронной плотности и электронных переходов в молекулах, количественного анализа заселенностей атомов в соединениях, а также построения компактных атомных базисных наборов для прецизионного релятивистского моделирования электронной структуры молекул.

Предлагаемый подход к приближённому расчёту приведённых матриц плотности (как для отдельных электронных состояний, так и переходных) в рамках релятивистского метода связанных кластеров в пространстве Фока (FS CC) основан на формализме эффективных операторов и заключается в прямой подстановке экспоненциально параметризованного волнового оператора в выражение для эффективного оператора и последующем сохранении членов максимум второго порядка по амплитудам кластерного оператора [1]. Показано, что в случае выполнения условия промежуточной нормировки волновой функции полученное выражение может быть представлено только связанными диаграммами, что гарантирует размерную согласованность рассчитываемых матриц плотности чистых состояний и средних значений операторов свойств (а также переходных матриц плотности при некоторых дополнительных условиях). Новый подход делает возможным экономичный расчёт матриц плотности для десятков и сотен электронных состояний одновременно. Разработанная техника была реализована в пакете программ EXP-T [2] для модели с включением одно- и двукратными возбуждениями в кластерном операторе (приближение CCSD) и секторов пространства Фока с одной, двумя и тремя частицами над замкнутой оболочкой.

В качестве пилотного приложения рассмотрена задача о построении компактных сжатых наборов гауссовых функций типа атомных натуральных орбиталей (ANO) для тория методом усреднения по матрицам плотности состояний, актуальных для рассматриваемой задачи [3]. Показано, что при условии тщательного отбора сжатых функций получаемые базисные наборы обеспечивают сбалансированную точность для основного и низколежащих возбужденных состояний и могут быть использованы для полностью релятивистских высокоточных расчётов, учитывающих вклады возбуждений высоких порядков.

Разработка нового метода построения матриц плотности, его программная реализация в пакете EXP-T и генерация компактных базисных наборов для Th выполнены А.В.О. и А.В.З. в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ за счет гранта Российского научного фонда №20-13-00225-П, <https://www.rscf.ru/project/23-13-45028/>.

Квантовохимическое моделирование механизма сборки пиррола из фенилацетилена и бензонитрила в суперосновной среде КОВu^t/DMSO***Ю.А. Орлюк^{1,2}, А.С. Бобков¹, Е.Ю. Шмидт², Н.М. Витковская¹***

E-mail: yuliya@cc.isu.ru

¹Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия²Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия

Пиррол является структурным элементом многих биологически важных соединений (хлорофилл, гемоглобин, витамин В₁₂, алкалоиды). Производные пиррола широко используются в медицине (антибиотики, противотуберкулезные и противораковые препараты) и материаловедении (электрохромные и электропроводящие полимеры, сенсоры и флуорофоры). Недавно была открыта и разработана уникальная реакция ацетиленов с нитрилами в суперосновной среде КОВu^t/DMSO, позволяющая в одну препаративную стадию в мягких условиях (20–25°C, 15 мин) получать полиариллированные пирролы [1].

Методами квантовой химии (B2PLYP-D3/6-311+G**//B3LYP-D3/6-31+G* + IEF PCM) исследован механизм сборки 2-бензил-3,5-дифенил-4-(фенилэтинил)-1H-пиррола из фенилацетилена и бензонитрила в суперосновной среде КОВu^t/DMSO. Моделирование реакции проведено в анионной модели, включающей в качестве основания в явном виде, только трет-бутоксид-ион, а растворитель (DMSO) учтён в континуальной модели (IEFPCM), дополнительно учтено изменение энтропии при переходе из газовой фазы в DMSO [2].

Механизм сборки пиррола начинается с безбарьерного депротонирования фенилацетилена, что приводит к образованию фенилэтинид-иона PhC≡C⁻, присоединение которого к C≡N связи бензонитрила осуществляется с барьером активации ΔG[‡]=18.3 ккал/моль. Вторая стадия также начинается с генерирования PhC≡C⁻ с барьером ΔG[‡]=5.5 ккал/моль. Дальнейшее присоединение второго PhC≡C⁻ к C≡C связи образующегося 1,3-дифенил-2-инимина происходит с бóльшим барьером (ΔG[‡]=19.8 ккал/моль) по сравнению с первой стадией. На третьей стадии образование PhC≡C⁻ характеризуется барьером ΔG[‡]=0.3 ккал/моль. Атака третьего PhC≡C⁻ по C=C связи промежуточного 1,4-дифенил-2-бензилиденимина осуществляется с наименьшей энергией активации (ΔG[‡]=12.1 ккал/моль) по сравнению с предыдущими стадиями. Нуклеофильная атака NH-функции по атому C4 при C≡C связи приводит к замыканию пирролинового цикла с барьером ΔG[‡]=20.7 ккал/моль. Заключительная прототропная перегруппировка пирролина в 1H-пиррол осуществляется с небольшим барьером (ΔG[‡]=4.5 ккал/моль).

В результате проведенного квантовохимического исследования показано, что механизм сборки 1H-пиррола из фенилацетилена и бензонитрила включает 5 основных стадий: три последовательные стадии этинилирования, внутримолекулярное N-винилирование и прототропную перегруппировку. Стадия циклизации с образованием промежуточного пирролина является лимитирующей и характеризуется умеренным активационным барьером ΔG[‡]=20.7 ккал/моль, преодолемым в условиях эксперимента (20–25°C, 15 мин.).

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № FZZE-2024-0002 и при финансовой поддержке гранта Иркутского государственного университета для молодых учёных № 091-24-306 «Квантовохимическое моделирование сборки тетразамещенного пиррола из бензонитрила и трех молекул фенилацетилена в суперосновной среде КОВu^t/DMSO»

1. Rapid, room-temperature self-organization of polyarylated 1H-pyrroles from acetylenes and nitriles in the КОВu^t/DMSO system / E.Y. Schmidt, I.V. Tatarinova, N.A. Lobanova, I.A. Ushakov, I.Y. Bagryanskaya, B.A. Trofimov // *Org. Biomol. Chem.* — 2023. — V. 21, N. 35. — P. 7209–7218.
2. Nucleophilic Addition of Ketones To Acetylenes and Allenes: A Quantum-Chemical Insight / N.M. Vitkovskaya, V.B. Kobychiev, A.S. Bobkov, V.B. Orel, E.Y. Schmidt, B.A. Trofimov // *J. Org. Chem.* — 2017. — V. 82, N. 23. — P. 12467–12476.

Применение тензорных разложений для решения уравнений метода связанных кластеров

Румянцев А.С.¹, Олейниченко А.В.^{1,2}, Зайцевский А.В.^{1,3}

E-mail: attoatom@gmail.com

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Долгопрудный, Россия

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

При теоретическом моделировании электронной структуры материалов, содержащих f-элементы, такие как лантаноиды и актиноиды, необходимо учитывать одновременно релятивистские и корреляционные эффекты с высокой точностью. Одними из наиболее эффективных методов для этой цели являются подходы, основанные на теории волновой функции, например, релятивистский метод связанных кластеров (RCC). Однако их применение к исследованию подобных соединений требует чрезвычайно ресурсоемких вычислений. Снижение вычислительной сложности, уменьшение объемов хранимых данных и соответственно расширение возможностей подобных методов может быть достигнуто при помощи тензорных разложений входящих в уравнения многомерных массивов.

В рамках данной работы был проведен тщательный анализ различных типов тензорных разложений: канонического разложения [1], "тензорного поезда" [2] и разложения Таккера [3]. Были найдены оптимальные алгоритмы для нахождения приближенного разложения тензоров молекулярных интегралов и кластерных амплитуд, а также выполнена оценка вычислительной сложности алгоритмов, которые реализуют основные операции рабочих уравнений метода связанных кластеров.

Впервые уравнения метода связанных кластеров для основного состояния были сформулированы непосредственно в терминах тензорных поездов, включая версии метода, учитывающие вклады трехкратных возбуждений в волновые функции. Также впервые выполнена программная реализация, добавленная в квантовохимический пакет EXP-T [4], и проведены пилотные расчеты методом CCSD, которые продемонстрировали преимущества решения уравнений метода связанных кластеров на основе "тензорных поездов".

1. Kolda T. G., Bader B. W. Tensor Decompositions and Applications // SIAM Review. 2009. V. 51, no. 3. PP. 455–500. doi: 10.1137/07070111X.
2. Oseledets I. V. Tensor-Train Decomposition // SIAM Journal on Scientific Computing. 2011. V. 33, no. 5. PP. 2295–2317. doi: 10.1137/090752286.
3. Tucker L. R. Some mathematical notes on three-mode factor analysis // Psychometrika. 1966. V. 31, no. 3. PP. 279–311. doi: 10.1007/BF02289464.
4. Oleynichenko A. V., Zaitsevskii A., Eliav E. Towards High Performance Relativistic Electronic Structure Modelling: The EXP-T Program Package // Supercomputing. Springer International Publishing, 2020. PP. 375–386. doi: 10.1007/978-3-030-64616-5_33.

Ionization potential and electron affinity of element 119*A.R. Saetgaraev¹, I.I. Tupitsyn¹, D.P. Usov¹, I.M. Savelyev¹, N.K. Dulaev¹, L.V. Skripnikov^{1,2}*

E-mail: amir.saetgaraev@yandex.com

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

The discovery and study of new chemical elements has been one of the most important areas of physical research for a long time [1]. Currently, the heaviest synthesized superheavy element (SHE) is oganesson (Og, $Z = 118$) [2], which completes the seventh period of the periodic table. The lightest of the experimentally undefined elements is eka-francium, also known as ununennium (Uue, $Z = 119$). An attempt to synthesize the 119th element was made at the Helmholtz Centre for Heavy Ion Research (GSI) [3]. For several years, the experiment has been conducted at the RIKEN Nishina Center [4]. Plans to synthesize eka-francium are being made by scientists from the Joint Institute for Nuclear Research (JINR) [5] and the Institute of Modern Physics of the Chinese Academy of Sciences (IMP) [6].

The interest in studying properties of superheavy elements is largely driven by the desire to determine the limits of applicability of the periodic law, according to which elements in the same group have similar properties. However, it is not uncommon for some properties of superheavy elements to differ significantly from those of their lighter homologs. The difference in the electronic structure of superheavy elements from that of their lighter homologs is caused, on the one hand, by the increasing influence of relativistic effects associated with the increasing nuclear charge, and on the other hand, by the influence of electronic correlations associated with the increasing number of electrons.

This work presents the optimization of the basis set for eka-francium, obtained in [7] using the p-GCDF method. With its help, the values of the ionization potential and electron affinity for this element were calculated within the framework of the coupled-cluster method. Optimization of the basis set significantly affects ionization potential and electron affinity of the 119th element: both values increase by approximately 0.15 eV. This is particularly noticeable for the electron affinity, with a change of around 60% of its value calculated using the unoptimized basis set. The calculations were carried out using the DIRAC [8] and EXP-T [9] software packages.

This work is supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-62-00004)

1. Oganessian Y.T., Utyonkov V.K. Super-heavy element research // Reports on Progress in Physics. 2015. V. 78, No. 3. P. 036301.
2. Oganessian Y.T. et al. Synthesis of the isotopes of elements 118 and 116 in the ^{249}Cf and $^{245}\text{Cm}+^{48}\text{Ca}$ fusion reactions // Physical Review C—Nuclear Physics. 2006. V. 74. No. 4. P. 044602.
3. Khuyagbaatar J. et al. Search for elements 119 and 120 // Physical Review C. 2020. V. 102. No. 6. P. 064602.
4. Sakai H. et al. Facility upgrade for superheavy-element research at RIKEN // The European Physical Journal A. 2022. V. 58. No. 12. P. 238.
5. Oganessian Y.T. et al. First experiment at the Super Heavy Element Factory: High cross section of ^{288}Mc in the $^{243}\text{Am}+^{48}\text{Ca}$ reaction and identification of the new isotope ^{264}Lr // Physical Review C. 2022. V. 106. No. 3. P. L031301.
6. Gan Z.G. et al. Results and perspectives for study of heavy and super-heavy nuclei and elements at IMP/CAS // The European Physical Journal A. 2022. V. 58. No. 8. P. 158.
7. Miranda P.S. et al. Ab Initio correlated all electron Dirac-Fock calculations for eka-francium fluoride (E119F) // Journal of the Brazilian Chemical Society. 2012. V. 23. P. 1104-1113.
8. Saue T. et al. The DIRAC code for relativistic molecular calculations // The Journal of Chemical Physics. 2020. V. 152. No. 20.
9. Oleynichenko A.V., Zaitsevskii A., Eliav E. Towards high performance relativistic electronic structure modelling: The EXP-T program package // Russian Supercomputing Days. – Cham: Springer International Publishing, 2020. P. 375-386.

Ab initio исследование химических сдвигов рентгеновских эмиссионных спектров в галогенидах иттербия методом связанных кластеров

П.А. Хадеева^{1,2}, В.М. Шахова¹, Ю.В. Ломачук¹, Н.С. Мосягин¹, А.В. Титов^{1,2}

E-mail: khadieieva_p@pnpi.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Теоретическое исследование химических сдвигов (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС) дает возможность оценить качество моделирования электронной структуры сложных химических соединений с тяжелыми d- и f-элементами в составе. Электронная структура таких соединений имеет близкие уровни энергии, что приводит к необходимости одновременного учёта корреляционных и релятивистских эффектов на высоком уровне точности. При помощи метода релятивистских связанных кластеров можно добиться стабильных высокоточных результатов, однако возникает проблема необходимости проведения длительных по времени и требовательных к объемам оперативной памяти расчетов. В связи с этим была разработана новая технология изучения периодических соединений – СТЕР (compound-tunable embedding potential) [1-3], которая дала возможность изучать фрагменты кристаллических соединений методами, основанными на теории волновой функции с высокой точностью.

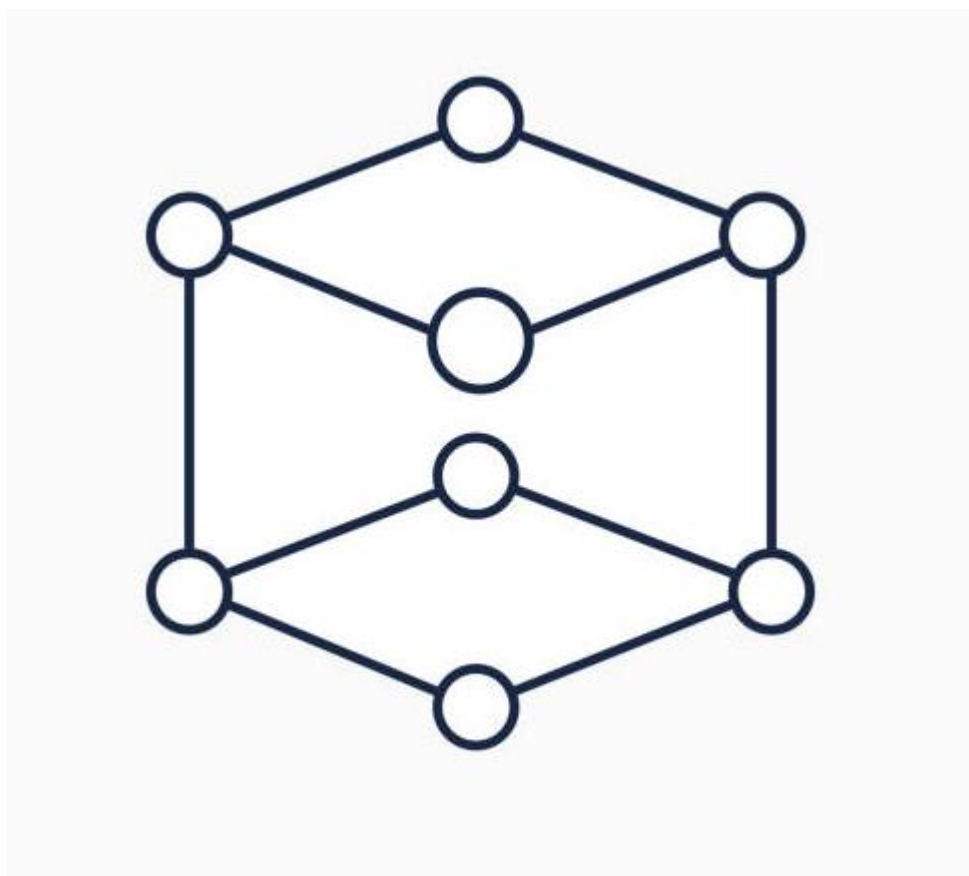
Распространённые теоретические подходы для исследования химических сдвигов линий рентгеновского эмиссионного спектра основываются на анализе заселенностей атомных орбиталей в рамках расчетов методом Дирака-Хартри-Фока для тяжелых атомов. Однако такие подходы практически не применимы для исследования соединений с тяжелыми d- и f-элементами в составе, поэтому был разработан двухшаговый метод расчета [4], в рамках которого сначала выполняется расчет электронной структуры соединения в валентной области методом псевдопотенциала, а затем она «восстанавливается» в остальной области тяжелых атомов.

В работе исследуются фрагменты СТЕР кристаллов галогенидов иттербия (YbNa_lX_n , $\text{Na}_l=\text{F Cl}$, $n=2,3$) при помощи релятивистского метода связанных кластеров. Данный подход имеет ограниченные возможности ввиду его огромной вычислительной сложности, поэтому необходимо проводить пилотные расчеты на более простых системах, в качестве которых были выбраны стехиометрические молекулярные системы. В первой части работы была проведена калибровка базисных наборов на молекулярных системах, а во второй части – проведены предварительные расчеты химических сдвигов линий рентгеновского эмиссионного спектра для фрагментов кристаллов СТЕР с помощью релятивистского метода связанных кластеров CCSD.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 20-13-00225: <https://www.rscf.ru/project/23-13-45028/>.

1. Shakhova V. M., Maltsev D. A., Lomachuk Y. V., Mosyagin N. S., Skripnikov L. V., Titov A. V. Compound-tunable embedding potential method: analysis of pseudopotentials for Yb in YbF_2 , YbF_3 , YbCl_2 and YbCl_3 crystals // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2022. V. 24. PP. 19333–19345.
2. Lomachuk Y. V., Maltsev D. A., Mosyagin N. S., Skripnikov L. V., Bogdanov R. V., Titov A. V. Compound-tunable embedding potential: which oxidation state of uranium and thorium as point defects in xenotime is favorable? // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020. V. 22. PP. 17922–17931.
3. Maltsev D. A., Lomachuk Y. V., Shakhova V. M., Mosyagin N. S., Skripnikov L. V., Titov A. V. Compound-tunable embedding potential method and its application to calcium niobate crystal CaNb_2O_6 with point defects containing tantalum and uranium // *Phys. Rev. B.* 2021. May. V. 103. p. 205105.
4. Lomachuk Y. V., Titov A. V. Method for evaluating chemical shifts of x-ray emission lines in molecules and solids// *PRA.* 2013. V. 88, 6. p. 062511.

Физика конденсированного состояния



Многостадийный твердофазный переход в нормальных алканах – триаконтане, дотриаконтане и гексатриаконтане***А.К. Борисов, С.А. Гурьева, В.М. Егоров, В.А. Марихин***

E-mail: Borisov.ak@bk.ru

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Температурный полиморфизм длинноцепочечных n-алканов на протяжении многих лет привлекает внимание исследователей по всему миру [1,2] ввиду отсутствия единого мнения о механизме структурных перестроений при переходе твердое тело \leftrightarrow расплав.

Целью настоящей работы является проведение прецизионных исследований, методом дифференциальной сканирующей калориметрии, фазовых превращений при нагревании n-алканов C_nH_{2n+2} с $n = 30, 32$ и 36 для установления механизма структурных трансформаций в твердом состоянии. Рассмотрение фазовых превращений с точки зрения теории размытых фазовых переходов [3] позволяет на основании анализа формы пиков теплоемкости выделить индивидуальные стадии в развитии многостадийных фазовых переходов и провести их независимый анализ.

В результате данной работы удалось впервые установить единую последовательность фазовых превращений в твердом состоянии в гомологическом ряду четных n-алканов: триаконтан $C_{30}H_{62}$, дотриаконтан $C_{32}H_{66}$ и гексатриаконтан $C_{36}H_{74}$. В области обычно наблюдаемого твердофазного перехода было выявлено наличие трех стадий, каждая из которых является индивидуальным гетерогенным фазовым переходом, т.е. протекающим через образование зародышей новой фазы в объеме предшествующей. Для каждой из стадий определены габитус (форма) зародышей новой фазы, ламеллярный в каждом случае, и рассчитан их объем. Установлено для всех образцов, что на пути перехода из моноклинной M_{011} в ротационную R_{III} фазу существуют две промежуточные фазы – орторомбическая O и моноклинная M_{101} . Кроме того, такой механизм перехода можно предположить единым во всех n-алканах с исходной M_{011} и ротационной R_{III} фазами.

Первое фазовое превращение $M_{011} \rightarrow O$ соответствует переходу из исходной моноклинной модификации (наклон молекул в bc -плоскости) в орторомбическую ячейку с вертикальным расположением молекул, зародыши новой фазы в данном случае охватывают две ламели. Затем происходит второе фазовое превращение $O \rightarrow M_{101}$, в результате которого молекулы вновь укладываются в ячейках с моноклинной симметрией, но с наклоном в ac -плоскости. На втором этапе $O \rightarrow M_{101}$ зародыши новой фазы немного увеличиваются и захватывают до трех ламелей. Третьим фазовым превращением является переход $M_{101} \rightarrow R_{III}$, т.е. превращение ячеек моноклинной симметрии в триклинные ротационные с появлением возможности дискретного вращения молекул вокруг своих осей в ламелях. Этот переход сопровождается образованием более крупных зародышей, охватывающих три ламели.

В целом гетерогенный характер фазовых превращений в протяженных n-алканах с $n = 30 - 36$ соответствует двум стадиям твердофазного перехода в более коротких n-алканах, исследованных нами ранее [4], с образованием более мелких зародышей на первой стадии и выпадением более крупных на последующей.

1. Briard A.-J. et al. Experimental Enthalpy Increments from the Solid Phases to the Liquid Phase of Homologous n-Alkane Series (C18 to C38 and C41, C44, C46, C50, C54, and C60) // J. Chem. Eng. Data. 2003. V. 48. No. 3. P. 497–513.
2. Blázquez-Blázquez E. et al. Synchrotron and Raman Study of the Rotator Phases and Polymorphism in Tricosane Paraffin // Polymers. 2020. V. 12. No. 6. P. 1341.
3. Малыгин Г.А. Размытые мартенситные переходы и пластичность кристаллов с эффектом памяти формы // УФН. 2001. Т. 171. № 2. С. 187–212.
4. Борисов А.К., Марихин В.А., Егоров В.М. Эффект четности – симметрии молекул n-алканов // ФТТ. 2024. Т. 66. № 5. С. 752–757.

Скоростной рост кристаллов KDP в присутствии примеси дикалийгидрофосфата

Н.А.Голодухин¹⁾, А.Н.Севрюкова^{1,2)}, Е.Л.Ким¹⁾

E-mail: thirdmate2@yandex.ru

¹⁾Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²⁾Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики имени А. В. Гапонова-Грехова РАН, Нижний Новгород, Россия

Кристаллы дигидрофосфата калия (KDP) традиционно используются в качестве оптических элементов — оптических затворов и преобразователей частоты лазерного излучения. Оптическое качество кристаллов KDP существенно зависит от состава раствора. Влиянию различных факторов на рост и свойства кристаллов KDP посвящено достаточно много работ [1-3]. Особое внимание уделяется исследованиям влияния pH раствора.

Целью работы является изучение влияния примеси $K_2HPO_4 \times 3H_2O$ на рост и оптические свойства кристаллов KDP.

В основном, для сдвига водородного показателя выше стехиометрического значения ($pH > 4$) для выращивания кристаллов KDP в раствор добавлялась щелочь KOH [1, 3]. Однако, преимущество получения реактива $K_2HPO_4 \times 3H_2O$ класса ОСЧ дает возможность использовать его в скоростном методе роста кристаллов KDP.

Для определения оптимальных значений были получены зависимости нормальных скоростей роста граней призмы от пересыщения. Отбор значений pH происходил по двум критериям: неизменность величины «мёртвой зоны» (диапазон пересыщений, при котором по мере увеличения пересыщения скорость роста грани призмы кристалла KDP практически равна нулю) с течением времени и наибольшей скорости роста грани призмы кристалла KDP при заданном пересыщении ($\sigma = 0.04$). Особое внимание указанным величинам придает выполнение условие моносекториальности скоростного метода роста кристаллов типа KDP. Для его выполнения необходимо определенное отношение скоростей роста призмы и бипирамиды грани роста кристалла. В большинстве случаев данное отношение равно единице. Скорости роста вышеуказанных граней будут близки при пересыщениях раствора заведомо больше величины «мертвой зоны».

При анализе полученных зависимостей скоростей роста от пересыщений были выбраны pH 5.06 и 5.56. Кристаллы выращивались в боросиликатных кристаллизаторах в течение 45 дней. Точка насыщения растворов с pH 5.06 и 5.56 соответственно равны $(48.3 \pm 0.2)^\circ C$ и $(48.5 \pm 0.2)^\circ C$. Для оценки оптического качества был проведен спектральный анализ. Величина пропускания выращенных кристаллов (~92%) выше, чем у кристаллов, выращенных из растворов стехиометрии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

1. M. Badrouj, R. Malekfar, The pH effects on the growth rate of KDP (KH_2PO_4) crystal by investigating Raman active lattice modes, JOURNAL OF RAMAN SPECTROSCOPY, 2007, 7.
2. De-Gao, Z., Bing, T., Sheng-Ming, D., Qing-Guo, W., Yan-Shuai, Z., Wan-Xia, H. and Tao, Y. (2009), Characterization of KDP crystal grown from solution with low pH value. Cryst. Res. Technol., 44: 500-504.
3. Д.А. Воронцов, В.П. Ершов, В.Н. Портнов, В.И. Родченков, А.А. Сибиркин, Кинетика роста граней {100} кристаллов KDP в нестехиометрических растворах. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2010, №4 (1), 5.

С.А. Гурьева¹, В.А. Марихин¹, Е.Н. Власова²

E-mail: swet.gurjewa@gmail.com

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

²Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

Явление полиморфизма длинноцепочечных молекулярных кристаллов *n*-алканов является одним из фундаментальных вопросов физики полимеров, поскольку ответ на него позволит описать структурные трансформации в более сложных высокомолекулярных соединениях с подобной ламеллярной надмолекулярной организацией.

Использование метода ИК Фурье-спектроскопии позволяет выявлять изменения симметрии основных ячеек и суб-ячеек в кристаллических сердечниках ламелей *n*-алканов при протекании твердофазного (структурного) перехода I рода (ФП-1) по тонким смещениям в спектрах молекулярных колебаний. Более того, удаётся обнаружить различия кинетики полиморфного перестроения кристаллической структуры при нагревании *n*-алканов разной чётности (трикозана C₂₃H₄₈ и тетракозана C₂₄H₅₀). Интерес к *n*-алканам разной чётности вызван различием симметрии укладки молекул в ламелях с вертикальным (для нечётных) и наклонным (для чётных) расположением цепей. Чётно-нечётные различия связаны с транс/дис симметрией молекул, что влияет на упаковку концевых СН₃ групп и приводит к появлению наклонных фаз, энергетически выгодных для чётных *n*-алканов.

Методом ИК Фурье-спектроскопии исследованы полиморфные превращения трикозана C₂₃H₄₈ и тетракозана C₂₄H₅₀ при нагревании [1]. Исследованы температурные изменения частот деформационных мод колебаний СН₂ транс-последовательностей и валентных колебаний С-Н связей. Установлено, что при ФП-1 исходные суб-ячейки (орторомбические или триклинные) *n*-алканов переходят в гексагональные. Оказалось, что чётность *n*-алканов влияет на возникновение очагов новой фазы либо в сердцевинах ламелей (для чётных), либо в межламеллярном пространстве (для нечётных) [2]. Более того, сделан вывод о том, что должны происходить более тонкие этапы реструктуризации, сопутствующие ФП-1. Это переходы между промежуточными ротационными фазами (*R_I*, *R_{II}*, *R_V*) [3], в которых возможно дискретное вращение молекул вокруг главных осей. Установлено, что формирование ряда промежуточных фаз осуществляется в зависимости от симметрии молекул и облегчает переход к новой кристаллической симметрии.

Проведён детальный анализ возникающих конформационных изменений на основании наблюдаемых температурных трансформаций ИК спектров в области $\nu = 700 - 1200 \text{ cm}^{-1}$, содержащей прогрессии маятниковых колебаний СН₂ групп (*P_k*) и валентных (скелетных) колебаний С – С связей (*R_k*), а также in-plane маятниковое колебание СН₃ групп (β) [4].

Выявлено нарушение регулярности цепей в сердцевинах ламелей на основании температурных изменений прогрессий колебаний (*P_k* и *R_k*). Обнаружено возникновение концевых гош-дефектов, число которых возрастает при каждом переходе между промежуточными ротационными фазами (*R_I*, *R_{II}*, *R_V*). Предложен механизм структурных перестроений в гомологах *n*-алканов.

1. Гурьева С.А., Марихин В.А., Власова Е.Н. Специфика полиморфизма *n*-алканов при температурных фазовых переходах // ФТТ. 2023. Т. 65. № 12. С. 2286–2294.
2. Gureva S.A., Borisov A.K., Marikhin V.A., Egorov V.M. Solid-state phase transition in *n*-alkanes of different parity // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 2086. P. 012182.
3. Sirota E.B., King H.E., Singer D.M., Shao H.H. Rotator phases of the normal alkanes: An xray scattering study // J. Chem. Phys. 1993. V. 98, No. 7. P. 5809–5824.
4. Гурьева С.А., Марихин В.А., Власова Е.Н. Влияние нарушения конформационного порядка на развитие твердофазных переходов в тетракозанах // ФТТ. 2024. Т. 66. № 9. С. 1562–1576.

Рамановское рассеяние в релаксорном сегнетоэлектрике PNT

Н.К. Деретс¹, С.А. Крылова², Т.А. Смирнова¹, С.Г. Лушников¹

E-mail: nikita.derets@gmail.com

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

²Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

Соединение $\text{PbNi}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ (PNT) относится к большому семейству кубических релаксорных сегнетоэлектриков с общей формулой $\text{AB}'\text{B}''\text{O}_3$. Несмотря на то, что данный кристалл был синтезирован ещё в 1960 году, в последнее время исследования PNT практически не велись. В недавней работе [1] было показано, что PNT имеет структуру кубического перовскита, а спектры рамановского рассеяния света в данном кристалле схожи со спектрами других сегнетоэлектриков-релаксоров. Тем не менее остаётся немало вопросов о динамике решётки PNT, и данная работа, таким образом, посвящена исследованию релаксоров с замещением в В подрешётке перовскита.

Монокристаллы PNT были выращены методом спонтанной кристаллизации. Рентгеноструктурный анализ, проведенный с помощью порошковой дифракции показал, что образцы PNT при комнатной температуре имеют перовскитную структуру, которая описывается в рамках пространственной группы $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ (221) с параметром элементарной ячейки $a = 4.02679(2)$ Å. Структура кристалла PNT и поведение оптических фононов в окрестности размытого фазового перехода, при котором наблюдается широкий, частотно-зависимый максимум диэлектрической проницаемости ($T_m \approx 89$ К) не изучались, что дополнительно мотивировало настоящие исследования.

Поляризованные спектры рамановского рассеяния света кристаллов PNT получены в температурном диапазоне 8–400 К в геометрии обратного рассеяния на спектрометре Horiba Jobin Yvon T64000 (Horiba Jobin Yvon SAS, Франция). В качестве источника возбуждения использовался твердотельный одномодовый лазер Spectra-Physics Excelsior (Spectra-Physics, MKS Instruments Inc., США) с длиной волны 532 nm. Также при комнатной температуре была получена угловая зависимость рамановских спектров обеих поляризаций, подобно тому как это было сделано для монокристаллов $\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{-Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$ в работе [2], что позволило наблюдать анизотропию спектров рамановского рассеяния света в кристаллах PNT.

В спектрах рамановского рассеяния света основные моды спектра были отнесены к компонентам E_1 и A_1 поперечного оптического фонона (LO1) и компоненте A_1 продольного оптического фонона (LO3). Предполагается, что компоненты моды TO1 активны как в VV- так и VH-поляризации. При анализе рамановских спектров PNT была выделена компонента рассеяния на несмещённой частоте – квазиупругое рассеяние света (QELS). При численных расчётах было проведено сравнение моделей лоренциана и затухающего гармонического осциллятора подобно тому, как это осуществлялось авторами работы [3]. На основании результатов обработки экспериментальных спектров была проанализирована анизотропия QELS и компонент фононных мод. Полученные результаты обсуждаются в рамках современных представлений о динамике структурных фазовых переходах в частично разупорядоченных кристаллах.

1. Левин А.А., Смирнова Т.А., Обозова Е.Д., Залесский В.Г., Федосеев А.И., Лушников С.Г. Сегнетоэлектрик-релаксор $\text{PbNi}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$: синтез, структура, спектры комбинационного рассеяния и диэлектрическая восприимчивость // Кристаллография. 2023. Т. 68, № 5. С. 722-733.
2. Kim T.H., Kojima S., Ko J.-H. Raman Scattering Study on Relaxor Ferroelectric $\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{-Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$ Single Crystals // J. Korean Phys. Soc. 2014. V. 65. No. 7. pp. 1078-1082.
3. Svitelskiy O., Toulouse J., Yong G., Ye Z.-G. Polarized Raman study of the phonon dynamics in $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ crystal // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. No. 104107.

Структурные и оптические свойства Ga₂O₃/GaN гетероструктур***А.Ю. Иванов¹, Ш.Ш. Шарофидинов², Д.Ю. Панов¹, А.Е. Романов^{1,2}***

E-mail: aivanov@itmo.ru

¹ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Оксид галлия (Ga₂O₃) – широкозонный полупроводниковый материал четвертого поколения, существующий в различных кристаллических модификациях. Наиболее термически стабильной является моноклинная β-фаза. β-Ga₂O₃ обладает запрещенной зоной E_g ≈ 4.85 эВ [1] и высоким критическим полем электрического пробоя E_{cr} ≈ 6 - 8 МВ/см. В последнее время наибольший интерес возникает к ε(κ)-Ga₂O₃ с шириной запрещенной зоны E_g ≈ 4.9 эВ [2], поскольку эта фаза обладает более высокой спонтанной поляризацией и открывает возможность проектирования высокопроизводительных устройств электроники и фотоники [3]. Для эпитаксиального роста ε(κ)-Ga₂O₃ в качестве материала подслоя могут быть использованы нитриды металлов III группы периодической системы элементов Д.И. Менделеева (III-N) благодаря схожему кристаллическому строению. Гетероструктуры ε(κ)-Ga₂O₃/III-N представляет значительный интерес для электроники из-за возможности формирования двумерного электронного газа на гетерогранице [4].

Целью данной работы являлось определение электрических и оптических свойств квазиобъемной эпитаксиальной гетероструктуры ε(κ)-Ga₂O₃/GaN отсоединенной в процессе охлаждения от темплейта SiC/Si.

В ходе работы исследовались гетероструктуры Ga₂O₃/GaN, полученные методом ХГФЭ. Методами рентгеновской дифракции анализировался фазовый состав выращенных гетероструктур (с использованием дифрактометра ДРОН-8, АО «ИЦ «Буревестник»). Была изучена морфология поверхности слоя оксида галлия, а также в геометрии поперечного сечения – строение гетерограницы Ga₂O₃/GaN (с использованием растрового электронного микроскопа (РЭМ) MIRA3, TESCAN GROUP). Были получены спектры пропускания методами UV-Vis-IR-спектроскопии с использованием интегрирующей сферы. Методом магнетронного напыления (на установке Q150R Plus, Quorum Technologies Ltd) на поверхность Ga₂O₃ был нанесен слой Au для формирования контакта Шоттки. Для получения омических контактов использовался In. Исследовались вольтамперные характеристики (ВАХ) сформированных приборных структур как при отсутствии освещения, так и при освещении мощными светодиодами с длинами волн 280 нм, 446 нм, 465 нм.

На гетерогранице были обнаружены V-дефекты, зарождающиеся в процессе эпитаксиального роста о Ga₂O₃. РЭМ-изображения поверхности толстого слоя Ga₂O₃ (101.1 мкм) показали наличие островков шестиугольной формы. Изучение спектров пропускания выявило наличие центров поглощения в ИК области спектра. ВАХ позволили оценить высоту потенциального барьера, возникающего на гетерогранице. Сделано заключение, что гетероструктуры с толстым слоем ε(κ)-Ga₂O₃ будут полезны для разработки электронных и оптоэлектронных устройств и смогут быть использованы в качестве темплейтов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-12-00229).

1. Galazka Z. β-Ga₂O₃ for wide-bandgap electronics and optoelectronics //Semiconductor Science and Technology. – 2018. – Т. 33. – №. 11. – С. 113001.2.
2. Lim N. et al. Ultrasensitive UV-C detection based on MOCVD-grown highly crystalline ultrawide bandgap orthorhombic κ-Ga₂O₃ //Applied Surface Science. – 2023. – Т. 609. – С. 155350.
3. Smirnov A. M. et al. Stress-strain state and piezoelectric polarization in orthorhombic Ga₂O₃ thin films depending on growth orientation //Materials & Design. – 2023. – Т. 226. – С. 111616.
4. Kang H. Y. et al. Epitaxial κ-Ga₂O₃/GaN heterostructure for high electron-mobility transistors //Materials Today Physics. – 2023. – Т. 31. – С. 101002.

Исследование эластомеров с наночастицами CoFe_2O_4 с помощью μSR -метода***В.С. Лобин, С.И. Воробьев, Е.В. Виноградов, А.Л. Геталов, Е.Н. Комаров, С.А. Котов***

E-mail: lobin_vs@npi.nrcki.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Для исследования магнитных свойств μSR -методом магнитореологических эластомеров были изготовлены образцы в виде дисков диаметром 64 мм и толщиной 9 мм. В качестве матрицы использована силиконовая резина (silicon rubber (SR), Globasil AD 27 type, from Globalchimica SRL), в которую перед полимеризацией вводилась феррожидкость. Феррожидкость (Ф) с 3% концентрацией магнитных наночастиц в воде была стабилизирована с использованием в качестве ПАВ додецилсульфат натрия $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{SO}_4\text{Na}$ с плотностью $\rho = 1,01 \text{ г/см}^3$ и лауриновой кислоты $\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{COOH}$ с плотностью $\rho = 0,88 \text{ г/см}^3$. Один мл феррожидкости содержал 0,17 г феррита кобальта, а на 1 г CoFe_2O_4 приходилось 0,25 г ПАВ. Исследованный образец был синтезирован в институте технической химии УО РАН [1, 2] со средним размером наночастиц $D = 8,5 \pm 0,1 \text{ нм}$.

Подготовлено два набора образцов с концентрацией 0, 5, 10 и 15% с неупорядоченной и с упорядоченной ориентацией магнитных моментов наночастиц CoFe_2O_4 . Полимеризация образцов второго набора была поведена в магнитном поле 80 кА/м, перпендикулярном плоскости диска.

Измерялись временные спектры позитронов распада мюонов, остановившихся в образцах. Измеренные временные спектры описывались с помощью выражения:

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau_\mu) [1 + a G(t)] + B, \quad (1)$$

где N_0 – нормировочная константа; τ_μ – время жизни мюона (2.197 мкс); a – асимметрия позитронов от распада мюонов, остановившихся в образце и $G(t)$ – функция релаксации поляризации мюонов, остановившихся в образце. B – вклад от фона случайных совпадений. Величина и временная структура фона случайных совпадений (B) определялись из обработки событий начальной области спектра до t_0 . Функция релаксации поляризации мюонов, остановившихся в образце $G(t)$ во внешнем поле H , была выбрана:

$$G(t) = \cos(2\pi F \cdot t + \varphi) \cdot \exp(-\lambda \cdot t) \quad (2)$$

μSR -методом было проведено исследование магнитных свойств эластомеров в зависимости от концентрации наночастиц CoFe_2O_4 в магнитном поле 512 Гс при температуре 290 К. Измерена величина магнитного поля, создаваемого однодоменными наночастицами CoFe_2O_4 , которые увеличиваются пропорционально концентрации наночастиц.

1. S.N. Lysenko, R.M. Yakushev, V.N. Strel'nikov, Yu.I. Gabdrakhimova, I.A. Borisova, Russian Journal of Applied Chemistry **83**(8), 1399 (2010).
2. R.M. Yakushev, S.N. Lysenko T.G. Tiunova et al., Colloid Journal, **75**(2), 226 (2013).
3. S.G. Barsov, S.I. Vorob'ev V.P. Koptev et al., Instruments and Experimental Techniques **50**(6), 750(2007).

С.Д. Ляжков^{1,2}

E-mail: sergeiliazhkov@gmail.com

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Перенос тепловой энергии на макроуровне, как известно, является диффузионным и подчиняется закону Фурье, при использовании которого в качестве определяющего соотношения, может быть разрешён огромный пласт задач в механике сплошных сред (см., в частности, [1]). Однако, теоретические работы (см., в частности, [2]) и недавние эксперименты (см., в частности, [3]) показывают, что на микро- и наноуровне распространение тепловой энергии не является диффузионным, а, например, баллистическим. В частности, отклонения от закона Фурье показаны в таких материалах, как углеродные нановискеры [3], углеродные мембраны [4], графен [5] и т.д. Следовательно, развитие теории переноса тепловой энергии на микро- и наноуровне является актуальным как для необходимости описания таких экспериментов, так и для микро- и наноэлектронной промышленности (см., в частности, [6]) и ядерной энергетики [7].

В работе рассматривается нестационарный баллистический перенос тепловой энергии в полубесконечной цепочке Гука со свободным концом и произвольным источником тепла. Предложено аналитическое описание изменения во времени кинетической температуры в виде дискретного (точного) и континуального (приближённого) решений для этой величины. Континуализация дискретного решения для кинетической температуры произведена через асимптотическую оценку фундаментального решения задачи динамики цепочки на фронтах, бегущей и отражённой от свободной границы волн. Анализ континуального решения позволяет наблюдать явление антилокализации (аномально быстрое затухание теплового поля вблизи свободной границы) отражённой тепловой волны при любом начальном тепловом ударе (который может быть сгенерирован посредством ультракороткого лазерного импульса [8]). Показано, что внезапный точечный подвод тепловой энергии приводит к переходу в неравновесное стационарное состояние, которое локально может наблюдаться даже при отсутствии диссипации.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 23-1-5-112-1).

1. Rickert W., Vilchevskaya E., Müller W. A note on Couette flow of micropolar fluids according to Eringen's theory //Mathematics and Mechanics of Complex Systems. – 2019. – Т. 7. – №. 1. – С. 25-50.
2. Rieder Z., Lebowitz J. L., Lieb E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state //Journal of Mathematical Physics. – 1967. – Т. 8. – №. 5. – С. 1073-1078.
3. Anufriev R. et al. Quasi-ballistic heat conduction due to Lévy phonon flights in silicon nanowires //ACS nano. – 2018. – Т. 12. – №. 12. – С. 11928-11935. Huberman S. et al. Observation of second sound in graphite at temperatures above 100 K //Science. – 2019. – Т. 364. – №. 6438. – С. 375-379.5.
4. Johnson J. A. et al. Direct Measurement of Room-Temperature Nondiffusive Thermal Transport Over Micron Distances in a Silicon Membrane //Physical review letters. – 2013. – Т. 110. – №. 2. – С. 025901.
5. Xu X. et al. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene //Nature communications. – 2014. – Т. 5. – №. 1. – С. 3689.
6. Cahill D. G. et al. Nanoscale thermal transport //Journal of applied physics. – 2003. – Т. 93. – №. 2. – С. 793-818.
7. Buongiorno J. et al. Nanofluids for enhanced economics and safety of nuclear reactors: an evaluation of the potential features, issues, and research gaps //Nuclear Technology. – 2008. – Т. 162. – №. 1. – С. 80-91.
8. Ryabikin M. Y. E., Emelin M. Y. E., Strelkov V. V. Attosecond electromagnetic pulses: Generation, measurement, and application, attosecond metrology and spectroscopy //Uspekhi Fizicheskikh Nauk. – 2023. – Т. 193. – №. 4. – С. 382-405.

Т.А. Митрофанов, К.А. Гриценко, В.К. Беляев, З.А. Григорьева, В.В. Родионова

E-mail: fearmen7@gmail.com

Балтийский федеральный университет, г. Калининград, Россия

В настоящее время одной из важных задач в области магнитной сенсорики является продолжение исследований для повышения чувствительности датчиков, их миниатюризации и интеграции в устройства, уменьшения шумов, повышения стабильности и долговечности, а также повышение точности в изменяющихся условиях окружающей среды, что важно, например, для картирования магнитных полей [1, 2, 3]. Решение данных проблем может положительно повлиять на улучшение чувствительности и миниатюризацию датчиков магнитного поля, которые уже успешно внедрены в такие области, как биомедицинское обнаружение, контроль электромагнитного загрязнения, измерение электромагнитной совместимости и диагностика неисправностей оборудования [1, 2]. В датчиках магнитного поля на магнитооптических эффектах в качестве чувствительного элемента используются ферромагнитные пленки, например, из сплава пермаллоя [4]. Проведение исследований магнитных свойств тонких пленок, таких как микромагнитная структура, распределение полей рассеяния, а также поведение намагниченности во внешнем магнитном поле, позволяет получить информацию о магнитной анизотропии и магнитных взаимодействиях в образце, что является важным при разработке сенсорных элементов и настройке их функциональных свойств.

Одномерные и двумерные магнитоплазмонные кристаллы используются в сенсорики, так как они обладают фотонными и магнитооптическими эффектами, которые изменяются под действием магнитного поля. В работе были исследованы образцы двумерных магнитоплазмонных кристаллов на основе пермаллоя с помощью метода магнитно-силовой микроскопии. Высота рельефных элементов дифракционной решетки составила 85 ± 10 нм. Латеральные размеры элементов решетки кристалла варьировались в зависимости от изменения дозы экспонирования электронорезиста от 200 мкКл/См^2 до 600 мкКл/См^2 , использовавшегося при изготовлении образцов.

Были получены результаты относительно магнитной структуры образцов, а также распределения полей рассеяния от элементов дифракционной решетки, что позволит в дальнейшем провести анализ влияния магнитной доменной структуры на функциональные свойства образцов для их использования при разработке элементов датчиков магнитного поля.

1. Jun Peng, Shuo Zhang, Shuhai Jia, Xilong Kang, Hongqiang Yu, Shuming Yang, Shun Wang, Yaowen Yang A highly sensitive magnetic field sensor based on FBG and magnetostrictive composite with oriented magnetic domains // Measurement. - 2022. - №189.
2. Fayyaz Muhammad, Hu Hong, Peng Zhang, Qaisar Abbas Measurement of magnetic field components using a single passive SAW magnetic sensor // Sensors and Actuators A: Physical. - 2023. - №352.
3. Anuj Kumar, Davinder Kaur Magnetolectric heterostructures for next-generation MEMS magnetic field sensing applications // Journal of Alloys and Compounds. - 2022. - №897.
4. VK Belyaev, DV Murzin, NN Perova, AA Grunin, AA Fedyanin, VV Rodionova Permalloy-based magnetoplasmonic crystals for sensor applications // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2019. - №482. - С. 292-295.

Температурная зависимость сверхпроводящего параметра порядка в железосодержащем пниктиде $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$

И.А. Никитченко^{1,2}, С.А. Кузьмичев^{1,2}, А.Д. Ильина^{2,3}, К.С. Перваков², В.А. Власенко²,
А.С. Медведев², Т.Е. Кузьмичева²

E-mail: nikitchenkov.ia19@physics.msu.ru

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия

Соединение $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ принадлежит к недавно открытому структурному семейству 1144 сверхпроводников (СП) на основе пниктидов железа и является стехиометрическим аналогом известной ранее системы BaFe_2As_2 семейства 122. В $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ не наблюдается структурных и магнитных фазовых переходов, а оптимальные СП свойства при $T_c \approx 35$ К достигаются уже в стехиометрическом состоянии. Оба семейства, 122 и 1144, являются сверхпроводниками второго рода и весьма перспективны для практических применений благодаря высоким критическим плотностям тока при умеренных критических температурах, кроме того, соединение $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ также является химически устойчивым при экспонировании на открытом воздухе [1,2].

В рамках данной работы в поликристаллических образцах $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ при $T = 4.2$ К с помощью техники «break-junction» [3] создавались планарные контакты на микротрещине типа сверхпроводник-барьер-сверхпроводник (ScS). В исследуемых баллистических ($l > d$) контактах при $T < T_c$ реализуется эффект некогерентных многократных андреевских отражений (ЭНМАО), в этом случае на $dI(V)/dV$ -спектре появляются минимумы при смещениях $|eV_i| = 2\Delta_i$, где Δ_i – величина СП щели [4]. Таким образом, напрямую определялись величины и температурные зависимости СП параметра порядка вплоть до достижения T_c .

Ранее, для данного соединения при $T \ll T_c$ нами была показана реализация нескольких объемных параметров порядка: Δ_1 и Δ_2 , обладающих характеристическими отношениями 5.6, 3.9 соответственно, и, предположительно, малой СП щели Δ_3 с $2\Delta_3(0)/k_B T_c \approx 1.3$ [5]. Полученные для Δ_1 и Δ_2 температурные зависимости оказываются схожи друг с другом, отношение Δ_1/Δ_2 практически не меняется с температурой, что позволяет рассматривать их как проявление единого, анизотропного СП конденсата с большой СП щелью $\Delta_L(\theta)$, для которого $\Delta_1 \equiv \Delta_L^{\text{out}}$ и $\Delta_2 \equiv \Delta_L^{\text{in}}$ – максимальная и минимальная энергии связи куперовских пар в k -пространстве.

Используя двухзонную модель на основе системы уравнений Москаленко и Сула [6,7], мы совместно аппроксимировали экспериментальные температурные зависимости для $\Delta_L^{\text{eff}}(T) \equiv (\Delta_1(T) \times \Delta_2(T))^{1/2}$ и $\Delta_S(T) \equiv \Delta_3(T)$. Двумя свободными параметрами аппроксимации являлись $\alpha = \lambda_{LS}/\lambda_{SL}$, $\beta = (\lambda_{LL}\lambda_{SS}/(\lambda_{LS}\lambda_{SL}))^{1/2}$, где λ_{ij} – перенормированные константы связи. Полученные значения $\lambda_{LL} = 0.323$, $\lambda_{SS} = 0.235$, $\lambda_{LS} = 0.0601$, $\lambda_{SL} = 0.00881$ оказались типичными для случая сверхпроводника с достаточно слабым межзонным взаимодействием между СП-конденсатами в k -пространстве, что уже наблюдалось ранее для родственного СП-соединения $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ семейства 1144 [8].

1. Kuzmicheva T.E., *et al.* // Superconductivity: Fundamental and Applied Research. 2024. №2. P. 66–78.
2. Bhattacharyya A., *et al.* // Science China Physics Mechanics and Astronomy. 2018. V. 61. № 12.
3. Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. // ФНТ. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
4. Kuemmel R., *et al.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 3992–4009.
5. Kuzmicheva T.E., Kuzmichev S.A., Medvedev A.S. // JETP Letters. 2024. V. 119. № 9–10.
6. Москаленко В.А. // Phys. Met. Metall. 1959. V. 8. P. 25.
7. Suhl H., *et al.* // Physical Review Letters. 1959. V. 3. №12. P. 552–554.
8. Kuzmicheva T.E., *et al.* // J. Supercond. Novel Magn. 2024. V. 37. № 2. P. 379.

Флексодиэлектрический эффект в монокристаллах SrTiO₃***Е.Д. Обозова, А.В. Халипов, В.Г. Залесский***

E-mail: oed1990@gmail.com

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Политехническая 26, 194021 Санкт-Петербург, Россия

Явление взаимодействия поляризации и неоднородной деформации в диэлектрическом кристалле получило название флексоэлектрического эффекта [1]. Этот электромеханический эффект был открыт в конце 50 гг. прошлого века, а в настоящее время интерес к флексоэлектричеству стимулирован быстрым развитием нанотехнологий. В результате ряда исследований в этом направлении открыто целое семейство т.н. флексоидных эффектов, к которым относятся флексомагнитный, флексоионный, флексокалорический и др. эффекты, связанные с градиентами механических, электрических, магнитных и др. полей. Для описания флексоэлектрического эффекта разработана феноменологическая теория, согласно которой одно из электромеханических уравнений показывает связь между индуцированной поляризацией и градиентом деформации [1]. Предварительные оценки показывают, что поляризующее действие неоднородной деформации аналогично приложению внешнего электрического поля достаточно большой величины, которое способно вызвать появление ряда нелинейных эффектов. Известно, что сегнетоэлектрические материалы обладают значительным нелинейным диэлектрическим откликом на внешнее поле. Для обнаружения нового флексоидного эффекта, связанного с изменением диэлектрической проницаемости под действием неоднородной деформации, т.н. флексодиэлектрического эффекта (ФДЭ), целесообразно использовать виртуальный сегнетоэлектрик SrTiO₃, известный также как модельный флексоэлектрический материал.

В настоящей работе проводилось исследование ФДЭ в тонких 140-150 μm пластинах SrTiO₃ диаметром 10 mm, в которых регистрировалось изменение величины диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon$ на частоте 1 kHz, индуцированное сферическим изгибом (с величиной прогиба 1 μm). Неоднородная деформация создавалась под действием импульсов внешней механической нагрузки низкой частоты (период 2-3 s) и амплитудой до 1.0 N в интервале температур 77-300 K. На температурной зависимости относительной диэлектрической восприимчивости $\Delta\epsilon/\epsilon$ показано немонокотное возрастание этой величины от 0.2 до 1.5% при охлаждении от 300 до 110 K.

Полученные первые результаты по ФДЭ могут быть полезны для дальнейшего развития теории флексоэлектричества и применения новых методик исследования этого явления.

1. Tagantsev, A. K. Flexoelectricity in solids / A. K. Tagantsev and P. V. Yudin // World Scientific Publishing Co. – 2017. – 396 p.

Эксплуатационные свойства эпоксидной смолы модифицированной малослойным графеном

Н.Д. Подложнюк¹, А.А. Возняковский¹, С.В. Кидалов², А.П. Возняковский²

E-mail: podloznuknikita@gmail.com

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

²НИИСК им. С.В. Лебедева, Санкт-Петербург, Россия

В работе исследованы прочностные и теплофизические свойства композитов на основе эпоксидной смолы марки KER 828 модифицированной малослойным графеном. Выбранная марка эпоксидной смолы является аналогом ЭД-20, которая в свою очередь является самой доступной и распространенной маркой эпоксидной смолы в России. Малослойный графен является производным от однослойного графена. Он представляет собой пачку, состоящую из листов графена, в пачке до 10 листов [1]. Малослойный графен обладает более низкими значениями прочностных и теплофизических свойств в сравнении с однослойным графеном, однако его синтез и работа с ним значительно проще. Для получения малослойного графена использовался метод самораспространяющегося высокотемпературного синтеза [2].

Введение малослойного графена в эпоксидную смолу привело к увеличению прочности, износостойкости и теплопроводности.

При концентрации малослойного графена равной 1 масс.% прочность на изгиб композита составила 117 МПа при этом у чистой эпоксидной смолы прочность на изгиб равна 70 МПа. Увеличение прочности может быть связано с высокой прочностью самого малослойного графена и с тем, что малослойный графен может препятствовать распространению трещин в объеме материала за счет высокой площади поверхности.

Увеличение концентрации малослойного графена также увеличивает износостойкость эпоксидной смолы и при концентрации равной 1 масс.% износостойкость увеличивается в 1,5 раза. Износостойкость определялась путем трения стального цилиндра на поверхности образца. Увеличение износостойкости эпоксидной смолы происходит из-за уменьшения коэффициента трения и увеличения теплопроводности при введении малослойного графена.

Также удалось выяснить, что малослойный графен препятствует полному разложению эпоксидной смолы до газообразных веществ при нагревании.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №23-79-10254

1. Hung Lui C., Li Z., Chen Z., Klimov P.V., Brus L.E., Heinz T.F. // Nano Letters. 2010. V. 11, № 1. P. 164-169
2. Voznyakovskii A.A., Vozniakovskii A.P., Kidalov S. // Nanomaterials. 2022. V. 12, № 4. P. 657.

Сравнительное исследование анизотропии намагниченности и критических токов ВТСП лент бесконтактными методами

А.Е. Рудоминский¹, Д.С. Чикуров¹, М.П. Волков¹

E-mail: a.rudominskiy@mail.ioffe.ru

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Зависимость критического тока от величины и ориентации магнитного поля $J_c(H, \alpha)$ является существенной характеристикой ВТСП лент второго поколения, которая должна учитываться при проектировании современных сверхпроводящих магнитных систем азотного уровня температур. Большие величины J_c ВТСП лент (до 50 А на мм ширины ленты при $T = 77$ К) затрудняют резистивное определение зависимостей $J_c(H, \alpha)$ стандартным 4-х зондовым методом. Удобными бесконтактными методами определения зависимостей $J_c(H, \alpha)$ являются, во-первых, измерение методом захваченного потока в кольце при использовании системы постоянных магнитов [1] и, во-вторых, вычисление критического тока из измеренной зависимости намагниченности от величины и ориентации магнитного поля $M(H, \alpha)$.

В первом методе $J_c(H, \alpha)$ может быть определена только в интервале небольших магнитных полей, созданных системой постоянных магнитов. Во втором методе диапазон приложенного магнитного поля не ограничен, но пересчет значения намагниченности в значение критического тока требует привлечение теоретических моделей и учета возможного влияния поверхностного барьера.

Для сравнения значений критического тока, полученных при использовании этих двух бесконтактных методов, в нашей работе были проведены измерения зависимостей $J_c(H, \alpha)$ при $T=77$ К образцов ВТСП лент (SuperOx, Москва) методом захваченного потока в диапазоне магнитных полей $H \leq 1$ кОе и измерения намагниченности $M(H, \alpha)$ вибрационным магнитометром в широком интервале полей.

Зависимости $J_c(\alpha)$, измеренные для ряда полей H методом захвата магнитного потока, демонстрируют в целом уменьшение критического тока с увеличением угла от $\alpha = 0$ (поле параллельно плоскости ленты) и при этом имеют следующие особенности: а) Полученные зависимости J_c оказываются симметричными при изменении знака тока и не симметричными относительно $\alpha = 0$. Такой сдвиг максимума $J_c(\alpha)$ наблюдался ранее в работе и может быть вызван непараллельностью слоя ВТСП и ленты [2,3]. б) Критический ток наиболее резко уменьшается при увеличении α в области малых углов, в больших полях наблюдается малое изменение J_c или выход на насыщение.

Форма зависимости $M(H)$ ВТСП ленты меняется слабо для разных α и является симметричной относительно $H = 0$ и $M = 0$ (кроме $\alpha \leq 15$, где проявляются магнитные свойства подложки). Величина намагниченности сильно уменьшается при переходе от угла $\alpha = 90^\circ$ к углу $\alpha = 0^\circ$ (примерно на 2 порядка), при этом наблюдается незначительное изменение величины намагниченности в пределах от 90° до 60° , слабое изменение в интервале $0^\circ - 15^\circ$, и существенное (на порядок) увеличение M при переходе от 15° к 60° .

Оценки критического тока, полученные с помощью модели критического состояния из зависимости $M(H, \alpha)$ показали хорошее согласие с результатами определения J_c методом захвата магнитного потока в кольце при $\alpha = 90$ и значением, сообщаемым производителем ленты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-29-00390

Авторы выражают благодарность фирме СуперОкс (Москва) за предоставление образцов ВТСП лент.

1. Д.С.Чикуров, А.Е.Рудоминский, М.П.Волков, Научное приборостроение, 2024, том 34, № 1, с.37–42.
2. D. M. Gokhfeld, S. V. Semenov, M. I. Petrov et al, J Supercond Nov Magn 36, 59 (2023).
3. S. Samoilenkov et al, EuCAS 202, 5-9 September 2021, Moscow, Russia

Диэлектрические свойства и полярное состояние монокристаллов $\text{PbMn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ ***А.В. Халипов, В.Г. Залесский, А.А. Левин, Т.А. Смирнова, С.Г. Лушников****Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Политехническая 26, 194021 Санкт-Петербург, Россия*

Кристаллы $\text{PbMn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (PMnN) относятся к семейству сложных перовскитов с общей химической формулой $\text{AB}'\text{B}''\text{O}_3$. В это семейство входят материалы с уникальными физическими свойствами: сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики, релаксоры-сегнетоэлектрики и мультиферроики [1]. Особое внимание вызывают соединения $\text{PbB}'\text{B}''\text{O}_3$ ($\text{B}' = \text{Fe}, \text{Ni}, \text{Co}, \text{Mn}$; $\text{B}'' = \text{Ta}, \text{Nb}$), в которых один из ионов в В-позиции обладает переменной валентностью и является магнитоактивным. Некоторые соединения из этой группы являются мультиферроиками, а в некоторых наблюдается фазовое расслоение [2]. В прикладном аспекте такие материалы могут быть использованы в устройствах спинтроники и в электромагнитных преобразователях микро- и наноскопического масштаба.

Из указанного семейства кристаллы PMnN являются наименее изученными и более того, сведения о качестве ранее полученных кристаллах и их физических свойствах остаются противоречивыми и детально не исследованными. Поэтому целью этой работы является синтез, выращивание монокристаллов и исследование их структуры и диэлектрических свойств.

Кристаллы PMnN черного цвета, кубической формы с размером сторон до 3 мм, были выращены методом спонтанной кристаллизации из расплава. Структура и состав изучены методами рентгеновской дифракции (XRD) с использованием графических методов профильного анализа XRD линий (size-strain plot, SSP) и методом Вильямсона-Холла (Williamson-Hall plot, WHP), а также полнопрофильным методом Ритвельда. Все рефлексы, наблюдаемые на XRD картине отнесены к рефлексам двух фаз перовскита с пр. гр. $Pm\bar{3}m$ (221) с близкими параметрами a кубической элементарной ячейки: 60.2(6) вес.% PMN1 ($a = 4.0271(3) \text{ \AA}$) и 35.6(4) вес.% PMN2 ($a = 4.0161(7) \text{ \AA}$) с составами $\text{Pb}(\text{Mn}_{0.54(4)}\text{Nb}_{0.46(4)})\text{O}_3$ и $\text{Pb}(\text{Mn}_{0.29(10)}\text{Nb}_{0.71(10)})\text{O}_3$, соответственно и 4.2(7) вес.% примесной фазы $\alpha\text{-PbO}$. Отличие составов фаз PMN1 и PMN2 предполагает наличие различных валентностей ионов Mn^{n+} ($n = 2, 3, 4$), Nb^{n+} ($n = 3, 5$).

В работе представлены результаты исследований температурных зависимостей проводимости на постоянном (DC) и переменном токе (AC) и комплексной диэлектрической проницаемости в диапазоне частот от 12 Гц до 100 кГц и в интервале температур 77-600 К. Полярное состояние кристалла исследовалось методом PUND, модернизированным методом исследования петель гистерезиса в сегнетоэлектриках повышенной проводимости.

Температурная зависимость диэлектрической проницаемости демонстрирует зависящие от частоты аномалии в интервале температур 170-250 К. Данные исследования AC- и DC- проводимости показали, что локальная проводимость, существующая при низких (<250 К) температурах, при нагревании переходит в сквозную проводимость. Результаты исследований обсуждаются в рамках модели фазового расслоения, ранее предложенной для родственного кристалла $\text{PbCo}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [2].

1. Smolensky G.A. Ferroelectrics and Related Materials / G.A. Smolensky // NY. Academic Press. - 1981. – 763 p.
2. Ханнанов Б.Х. и др. Разделение фаз и зарядовые состояния в релаксорном сегнетоэлектрике $\text{PbCo}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ // ЖЭТФ. 2020. Т.157. С. 523-531,

Особенности атомного и электронного строения металлуглеродного композита Co/PAN по данным XANES и XPS

И. В. Шишлов, В. А. Шматко, Г. Э. Яловега

E-mail: shishlov@sfnu.ru

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Популярными полимерными материалами, свойства которых активно изучаются, являются композиты на основе полиакрилонитрила. Благодаря своей структуре полиакрилонитрил может быть модифицирован, например, солями переходных металлов, с приданием ему высоких газочувствительных, электропроводящих и экранирующих свойств. Изменение свойств полимера может быть вызвано как индивидуальными свойствами металлов, вводимых при синтезе, так и комплексообразованием металла с атомами полимерной цепи. Поэтому исследования в области изучения локального атомного окружения и электронного строения материалов играют ключевую роль в области разработки и синтеза композитов с заданными физико-химическими свойствами.

В работе представлены результаты анализа экспериментальных спектров рентгеновского поглощения XANES за K-краем кобальта и рентгеновских фотоэлектронных спектров (XPS) металлуглеродного композита на основе полиакрилонитрила (PAN) и кобальта. Композит Co/PAN получен в виде тонкой плёнки методом пиролиза с последующим ИК-отжигом. Для приготовления плёнок использовался полиакрилонитрил (PAN), в качестве органической матрицы, хлорид кобальта CoCl_2 , в качестве модифицирующей добавки, и диметилформамид, в качестве растворителя [1].

Проведённые исследования атомного и электронного строения композита Co/PAN синхротронными методами XANES и XPS показали, что в результате получения композита нитрильная группа PAN раскрывается с образованием C-N и C=N связей, σ -связи углерода преобразуются в π -связи. Азот в композите присутствует в пирольной и пиридиновой формах, соотношение которых немного изменяется по глубине композита. Кобальт находится преимущественно в степени окисления Co^{2+} в соединениях с кислородом, и вероятно, образует координационные связи с азотом. Что подтверждается и finger print анализом XANES спектров. Локальное окружение катионов кобальта в композите – октаэдрическое, однако, размытие тонкой структуры спектра указывает на разупорядочение.

1. Yalovega G. E., Semenistaya T. Chemical bonding specifics of hybrid metal-polymer nanocomposites based on cobalt nanoparticles and polyacrylonitrile: X-ray spectroscopy investigation //Solid State Phenomena. – 2017. – Т. 257. – С. 175-178.

Физика и техника реакторов и ускорителей



М.М. Балачков

E-mail: mmb2@tpu.ru

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Одно из предназначений пакета программ (ПП) ЛОГОС заключается в теплогидравлическом расчёте ядерных реакторов, в частности, их активных зон. Но для корректного расчёта необходимо задать распределение удельного энерговыделения по высоте топливного столба. Неравномерность энерговыделения связана с особенностями нейтронной физики (расположение топлива в центре или на концах твэла, изменение плотности замедлителя по мере его продвижения вверх по активной зоне и другие эффекты) [1 с. 394]. Узнать распределение энерговыделения в твэле можно с помощью программы MCU-PTR. Для этого необходимо построить модель элементарной ячейки и произвести необходимый расчёт. Для автоматизации построения модели, создания входного для MCU-PTR файла и обработки результатов расчёта написана программа на языке Wolfram Language.

В написанной программе есть возможность изменять материальный состав топлива (делящиеся и воспроизводящие нуклиды: Th^{232} , $\text{U}^{233, 235, 238}$, $\text{Pu}^{238-242}$; разбавители: O, N, C; материал матрицы для дисперсионного ядерного топлива (ДЯТ): Si, Al, Mo и её объёмную долю) и оболочки твэла (Zr, Nb, Sn, Fe, Cr, Mo, Ni, Ti); плотности и температуры топлива, гелия в газовом зазоре, оболочки твэла и воды. Так же изменяются геометрические параметры элементарной ячейки: внутренние и внешние радиусы топлива и оболочки твэла, шаг расстановки твэлов под ключ. Таким образом, можно задавать широкий спектр водо-водяных реакторов с традиционным типом топлива – диоксид урана, так и с перспективными видами – нитридное, карбидное, плутоний-урановое, торий-урановое, торий-плутониевое, ДЯТ с силуминовой или молибденовой матрицей. Для нахождения распределения удельного энерговыделения по высоте топливного столба топливный столб и теплоноситель разбиваются на указанное пользователем количество интервалов. Плотность и температура теплоносителя линейно интерполируется исходя из плотности на входе и выходе из активной зоны.

В результате работы программы генерируется и запускается файл для MCU-PTR. Геометрически модель представляет собой элементарную ячейку ядерного реактора с заданными пользователем параметрами. Для нахождения энерговыделения используется регистрация скорости реакции деления. Общее количество историй в симуляции – 6 млн. После проведения расчётов данные с FIN файла считываются и нормируются на энерговыделение в одном твэле, конечная единица измерения – Вт/м³. Отнормированные данные записываются в файл электронных таблиц для упрощения дальнейшего использования и переноса данных в ПП ЛОГОС. Исходя из введённой пользователем надёжности, считываются и обрабатываются доверительные интервалы.

В качестве примера рассчитан твэл реактора ВВЭР-1000, топливный столб разбит на 10 частей. Минимальное и максимальное удельные энерговыделения при надёжности 0,95 составили $(6,9 \pm 0,5) \cdot 10^7$ и $(6,07 \pm 0,14) \cdot 10^8$ Вт/м³ соответственно, что близко к литературными данными (максимальное $4,5 \cdot 10^8$ Вт/м³) [2 с. 160]. Расхождение может быть связано различными используемыми параметрами (плотность топлива, обогащение топлива по U^{235} , распределение плотности воды по высоте активной зоны и другие).

Работа выполнена в рамках НИОКТР ПИШ-НИР-2024-006 №124070500010-4.

1. Бартоломей Г.Г. и др. Основы теории и методы расчета ядерных энергетических реакторов : учебное пособие. – 3-е изд, перераб. и доп. – Екатеринбург : Юланд, 2016. – 512 с. ISBN 5-283-03804-2.
2. Белозеров В.И., Жук М.М., Кузина Ю.А., Терновых М.Ю. Физика и эксплуатационные режимы реактора ВВЭР-1000: Монография. М.:НИЯУ МИФИ, 2014. – 288 с. ISBN 978-5-7262-2016-1

Химическая термодинамика МТ с урановыми кернами при различных температурах и выгораниях

Н.С. Безрук, А.С. Иванов

E-mail: bezruk_ns@nrcki.ru

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

Разработка высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов (ВТГР) в России обусловлена желанием реализовать АЭС с химико-технологической частью для промышленного производства водорода. Топливо в реакторах типа ВТГР представляет собой микротвэлы (МТ), в состав которых входит топливный kern из диоксида урана, а также защитные слои. Один из защитных слоев является буферным, в котором накапливаются газообразные продукты деления (ГПД) – криптон и ксенон, а также оксиды углерода. ГПД, СО и СО₂ в буферном слое создают избыточное давление, которое может повлиять на целостность следующих защитных слоев.

Оксид углерода в буферном слое является продуктом взаимодействия углерода с кислородом, освободившимся вследствие акта деления урана и выхода кислорода из керна в буферный слой. В работе [1] исследована химическая термодинамика МТ при температуре 1000 °С. В результате термодинамического расчета показано, что кислород, образовавшийся в результате деления, взаимодействует с двуокисью урана, образуя связи с повышенной степенью стехиометрии: U₄O₉, U₃O₈ и UO₃. Такое поведение кислорода представляет большой интерес, поскольку атомы кислорода попросту могут связаться с топливом прежде, чем диффундируют из керна в углеродный буферный слой. Представляет несомненный интерес исследование термодинамики МТ в области температур 800-1600 °С при заданных выгораниях ядерного топлива.

В настоящей работе проведена оценка количества образующегося кислорода по двум моделям с помощью программного комплекса ИВТАНТЕРМО с базой данных термодинамических свойств индивидуальных веществ [2]. В первой модели «кern + буфер» термодинамическая система включает в себя химический состав и керна, и буфера. Проведено сравнение результатов с эмпирической формулой Хомана [3], которая подтверждена экспериментально и позволяет оценивать количество образующегося «свободного» кислорода в МТ. По итогу сравнения с эмпирической формулой модель «кern + буфер» не является корректной. Во второй модели «кern» топливный сердечник рассматривается отдельно от буферного слоя.

Большой частью работы является проведение термодинамического расчета систем при разных температурах. Проведена серия термодинамических расчетов керна при выгорании до 17,02 % т. а. в диапазоне температур 800–1600 °С. Термодинамические расчеты в исследуемом диапазоне температур были выполнены для модели «кern», модели «кern + буфер», а также для случая разгерметизации всего МТ.

Во всех моделях итоговое количество «свободного» кислорода увеличивается с увеличением температуры и выгорания, однако его значение остается пренебрежимо малым. В случае с моделью «кern» кислород полностью идет на взаимодействие с топливом.

1. Безрук Н.С., Иванов А.С. Моделирование давления СО в микротвэлах с UO₂ кернами // Сборник докладов. Подольск, ОКБ «ГИДРОПРЕСС», 2024. – 537 с.
2. Белов Г.В., Аристова Н.М., Бергман Г.А. и др. База данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ ИВТАНТЕРМО. Номер регистрации (свидетельства): 2015620634 от 17.04.2015.
3. Development of Improved Models And Designs For Coated-Particle Gas Reactor Fuels // Final Report Under The International Nuclear Energy Research Initiative (I-NERI). INEEL/EXT-05-02615, December 2004.

Газовое тормозное излучение вакуумных камер накопительного кольца синхротрона с энергией электронов до 6 ГэВ

И.Д. Садофьев, М.П. Панин

E-mail: IDSadofev@mephi.ru

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

Для оценки безопасности выполнены расчеты радиационных полей, создаваемых электронными пучками накопительного кольца синхротрона с энергией 6 ГэВ и током до 200 мА. Примерами таких синхротронов служат комплекс ESRF (Франция) и строящийся синхротрон-лазер СИЛА (Россия). Рассмотрена радиационная обстановка в пределах канала накопительного кольца синхротрона и в зоне вывода пучка СИ, учтены вторичные заряженные частицы и фотонейтроны, образованные вследствие развития электромагнитных каскадов в совокупности с фотоядерными реакциями. Моделирование радиационных полей, возникающих при работе синхротрона, выполнялось методом Монте-Карло с помощью программного пакета GEANT4. Для моделирования объектов сложной геометрической формы использовался интерфейс CADMesh [1]. Приводятся результаты для мощности эффективной дозы, а также угловые и спектральные распределения фотонного, электронного, позитронного и нейтронного излучений вблизи вакуумной камеры накопительного кольца. Данные по мощности эффективной дозы общего облучения получены на основе расчета плотности потока и переходных коэффициентов, приведенных в 119 Публикации ICRP [2].

Расчетами показано, что внутри канала ускорителя при токе пучка 200 мА мощность дозы за счет газового тормозного излучения, а также электронного, позитронного и нейтронного излучений достигает 15 мкЗв/ч за пределами вакуумной камеры. При этом мощность дозы внутри линии вывода СИ при токе 200 мА составляет до 1 Зв/ч на оси пучка, до 200 мкЗв/ч в пределах 10 см от оси пучка и до 7 мкЗв/ч на расстоянии 1 м от оси пучка. Основными дозообразующими излучениями вблизи оси пучка являются гамма-кванты, электроны и позитроны в равных долях, а на расстояниях более 1 м преобладают электроны и нейтроны, вклад остальных излучений не превышает 1%. Угловое распределение тормозного и вторичного излучения в зоне вывода СИ резко анизотропное. Характерный угол, содержащий 50% излучения по суммарному потоку частиц, оценивается величиной 0,0049 град.

Конструкция защитных сооружений зоны вывода синхротронного излучения, используемая для ускорителя ESRF и состоящая из вольфрамового поглотителя толщиной 10 см и бетонной стены толщиной 1 м со свинцовой накладкой толщиной 1 см, достаточна для ускорителя СИЛА и обеспечивает мощность эффективной дозы за окончанием линии вывода СИ не выше 0,06 мкЗв/ч.

1. C. Poole et al. A CAD interface for GEANT4. // Australasian physical & engineering sciences in medicine. – 2012. – №35. – P. 329-334.
2. ICRP, 2012. Compendium of Dose Coefficients based on ICRP Publication 60. ICRP Publication 119. Ann. ICRP 41(Suppl.)

Динамика растворимости газов в потоке теплоносителя

М.Б. Смирнов¹, А.М. Осипов¹, А.О. Гольцев^{1,2}, А.В. Рябов¹, С.В. Прохоренков¹, Х.Ю. Попандоуло²
E-mail: mixon2901@mail.ru

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, Россия*

Реактивность в ядерном реакторе может изменяться из-за различных эффектов: изменение температуры топлива (температурный эффект реактивности K_T), изменение доли пара в потоке теплоносителя (паровой коэффициент реактивности $K_{пар}$), накопление осколков деления (“отравление” ксеноном K_{Xe} и самарием K_{Sm}) и т.д.

Изменение нейтронно-физических характеристик активной зоны, связанное с изменением режима течения теплоносителя, часто называют гидродинамическим эффектом реактивности (ГДЭР). В некоторых ядерных установках регулирование расхода теплоносителя может приводить к изменению реактивности системы. Данный эффект наблюдался на экспериментальных реакторах *ВОРОНЕЖ* и *ИБР-2М* ^[1,2]. В данных случаях возникновение ГДЭР обосновано аксиальным смещением ТВС, вызванным потоком теплоносителя. В каждом конкретном примере причина ГДЭР может быть своя. Так, для реакторных установок с сильной зависимостью нейтронно-физически характеристики от плотности теплоносителя ГДЭР может определяться газовыделением в потоке теплоносителя при прохождении через каналы со сложной геометрией, что вызывает изменение эффективной плотности жидкости и влияет на кинетику реактора.

В данной работе представлены результаты экспериментов по регистрации газовой выделению в потоке теплоносителя при прохождении через участок гидравлического сопротивления, а также качественные и количественные оценки наблюдаемых эффектов.

Эксперименты по газовой выделению в водяном теплоносителе были проведены на стенде с шариковой засыпкой расположенном в *НИУ МЭИ* на кафедре общей физики и ядерного синтеза (*ОФиЯС*). Стенд работал в открытом (бак с водой находится в контакте с атмосферой) и закрытом (контур замкнут) режимах. Теплоносителем была вода с естественным содержанием газов. Показания расхода теплоносителя, давления в контуре, перепада давления на рабочем участке (*РУ*) записывались в базу данных.

При выполнении данной работы были получены следующие результаты:

- экспериментально подтверждено, что при прохождении теплоносителем участка местного гидравлического сопротивления наблюдается процесс газовой выделению;
- кол-во наблюдаемых пузырьков в теплоносителе после участка гидравлического сопротивления больше, чем перед ним, что указывает на активацию процесса газовой выделению непосредственно при прохождении участка;
- выделение газа происходит наиболее интенсивно в моменты повышения расхода теплоносителя;
- проведена оценка выделившегося газа (кислорода) по формуле Генри.

Для более точного количественного анализа наблюдаемого явления на данной экспериментальной установке необходима разработка автоматизированной системы научных исследований (АСНИ) для наблюдения за процессом газовой выделению и проведение экспериментов при разных параметрах теплоносителя (давление и температуре).

1. Н.А. Виногоров. Гидродинамический эффект реактивности реактора с водным теплоносителем // ТЕХНОЛОГИИ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ЯЭУ, № 1 (27), 2022
2. Ананьев В. Д. и др. Физический пуск модернизированного реактора ИБР-2 (ИБР-2М) // Препринт ОИЯИ Р. – 2012. – С. 13-2012.

Радиационные характеристики РАО и продолжительность постэксплуатационного контроля ППЗРО

О.Ю. Стегачева¹, М.В. Васильева¹, В.В. Ирошников¹

E-mail: oystegacheva@rosatom.ru

¹АО «КИС «ИСТОК», Санкт-Петербург, Россия

Цель анализа – определение периода административного контроля ППЗРО, то есть срока, устанавливаемого в проекте ППЗРО, в течение которого эксплуатирующей организацией или иным уполномоченным органом осуществляется периодический радиационный контроль и мониторинг системы захоронения РАО (период активного административного контроля) и сохраняются знания о ППЗРО (период пассивного административного контроля).

Для ППЗРО предполагается, что в период административного контроля ППЗРО доступ населения на территорию закрытого ППЗРО ограничен и контролируется, однако возможно проживание населения на прилегающих к ППЗРО территориях, ведение строительной, сельскохозяйственной и иной промышленной деятельности, ограниченной определенными условиями. После окончания периода административного контроля предполагается неограниченный доступ человека на территорию закрытого ППЗРО [1].

В данной работе проведен анализ долговременной безопасности в части внешнего облучения от твердых радиоактивных отходов (ТРО) в закрытом ППЗРО в период потенциальной опасности РАО Белорусской АЭС.

Через 600 лет выдержки удельная активность хранящихся ТРО в ППЗРО снижается ниже допустимых удельных активностей неограниченного использования согласно ОСПОРБ-99/2010. Через 600 лет хранения не требуется разрешение органов исполнительной власти, уполномоченных осуществлять государственный санитарно-эпидемиологический надзор, на использование этого источника.

В Нормах [2] устанавливается граничная доза, которая позволяет не распространять действие санитарных правил на источники излучения, создающие при любых условиях обращения с ними индивидуальную годовую эффективную дозу при нормальной эксплуатации не более 10 мкЗв (с учетом установленной квоты), в аварийных случаях – 1 мЗв.

Полученные значения мощности дозы в результате расчетов в программе MCNP4B и анализа полученных результатов позволяют сделать следующие выводы:

- после закрытия ППЗРО не требуется установление санитарно-защитной зоны, т.к. мощность дозы на поверхности отсека хранения не превышает 10 мкЗв/год;
- в результате проведенного анализа определено возможное время активного административного контроля;
- при времени выдержки РАО более 300 лет в случае потери информации о месторасположении ППЗРО в работе рассмотрены возможные сценарии с аварийным вскрытием (повреждением) физических барьеров (строительство дорог, возведение домов и аварийное воздействие буровой установки).

1. РБ-117-16. Руководство по безопасности при использовании атомной энергии «Оценка долговременной безопасности пунктов приповерхностного захоронения радиоактивных отходов».
2. Нормы безопасности МАГАТЭ № SSR-5. Захоронение радиоактивных отходов МАГАТЭ, Вена, 2011 год.

Применение ПП ЛОГОС для расчета теплофизических параметров узлов реакторных установок

Е.А. Суханов¹, А. Г. Горюнов¹, М.С. Кузнецов¹

E-mail: eas70@tpu.ru

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия

В современном мире активно развиваются цифровые технологии позволяющие моделировать различные физические процессы в сложных технологических системах и установках. Математическое моделирование позволяет обосновывать безопасность сложных ядерных установок на всех этапах проектирования, эксплуатации и вывода из эксплуатации, позволяя рассмотреть штатные и чрезвычайные ситуаций без вреда окружающей среде и населению. Для таких расчетов активно применяют различные программы, одной из которых является отечественный пакет программ «ЛОГОС» [1]. В нем предусмотрены несколько различных расчетных модулей направленных на решение конкретных задач и определения физических параметров и характеристик. Наибольшее распространение в атомной отрасли получили модули теплофизического анализа, расчета гидравлических и прочностных характеристик.

Процесс моделирования теплогидравлических процессов, протекающих в активной зоне, а также в контурах циркуляции теплоносителя является непростой задачей, требующей учета различных взаимосвязанных процессов, и имеет большую значимость при эксплуатации реакторной установки. Целью данной работы является проведение моделирование в программном пакете «ЛОГОС» для проведения теплогидравлического расчета элементов реакторной исследовательской установки.

Для решения этой задачи необходимо построение расчетной модели тепловыделяющей сборки реактора. На первом шаге воспроизводится точная трехмерная модель ТВС с использованием, встроенного в пакет программ модуля по созданию и редактированию геометрических форм. Второй важной стадии проектирования является создание топологической сеточной модели, именно она будет использоваться ПП «ЛОГОС» при проведении моделирования [2]. Полученные результаты напрямую зависят от точности реализаций сеточной модели, но при увеличении количества ячеек увеличивается время расчета и нагрузка на вычислительные мощности. И последним шагом являлась задание начальных условий в виде начальной температуры, значения энерговыделения и давления теплоносителя в реакторной установке [3].

Обработка результатов моделирования осуществлялась во встроенном в ПП «ЛОГОС» модуле постобработки [1]. В работе приводятся полученные температурные распределения для разных участков топливного столба ТВС исследовательского реактора. В рамках проведения верификации получаемых в результате моделирования, использовались данные из ранее верифицированной модели ТВС, выявлена хорошая сходимость в рамках погрешности. Расхождение результатов объясняется тем, что использовался различный математический аппарат в качестве моделирования.

1. О программе Логос [Электронный ресурс]. – 2024. – Режим доступа: <https://advengineering.ru/ru/aden/software/mezhdisciplinarnyj-inzhenernyj-analiz/logos/o-programm>. – Загл. с экрана (дата обращения: 08.03.2024).
2. Суханов Е. А., Чуприков А. И. Разработка программного модуля по созданию топологии с учетом особенностей объекта для пакета программ «ЛОГОС» // Изотопы: технологии, материалы и применение: сборник тезисов докладов VIII Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов, Томск, 7-9 Ноября 2023. - Томск: ТПУ, 2023 - С. 143-144 8.
3. Лабораторный практикум на исследовательском ядерном реакторе ИРТ-Т. Часть I: учебно-методическое пособие / Аникин М.Н. Лебедев И.И., Наймушин А.Г., Овсенёв А.Е., Смольников Н.В., Худолеев П.Н. Национальный исследовательский Томский политехнический университет – Томск: Изд-во Национально-исследовательского Томского политехнического университета, 2021 г. – 95 с.

Использование программного пакета ЛОГОС для моделирования узлов исследовательского ядерного реактора ИРТ-Т

А.И. Чуприков¹, М.С. Кузнецов¹

E-mail: aic13@tpu.ru

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Исследовательские реакторы – это ядерные реакторы, которые используются в различных сферах научных исследований, разработок и образования. На территории г. Томск расположен реактор данного типа ИРТ-Т. Исследовательский реактор ИРТ-Т – это многофункциональная ядерная научная установка, на базе которой в наши дни проводят огромное количество научных исследований в различных областях: нейтронно-трансмутационное легирование, наработка медицинских и технических изотопов и нейтрон-захватная терапия.

Сейчас Томский политехнический университет (ТПУ) проводит подготовительные работы по продлению лицензии на право эксплуатации исследовательского ядерного реактора ИРТ-Т, которая заканчивается в 2035 году. Ранее для моделирования узлов реакторной исследовательской установки ИРТ-Т использовался зарубежный прикладной пакет программ «SOLIDWORKS», который в 2022 году ушел с российского рынка.

Целью данной работы является теплогидравлический расчет для узлов реакторной исследовательской установки ИРТ-Т.

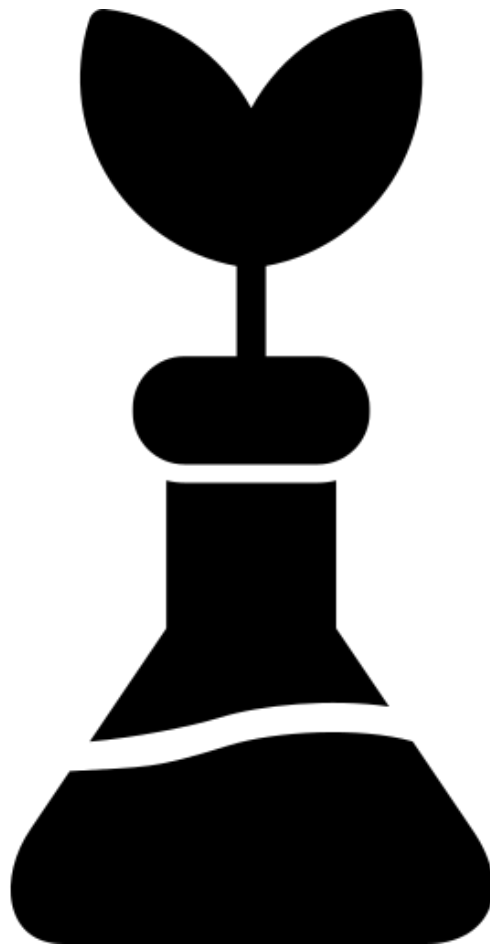
Для решения этой задачи был произведен расчет значений энерговыделения для каждой ТВС в MCU-PTR с применением модулей ZPHEN и MPHEN. Наиболее энергонапряженной восьми-трубной ТВС является сборка под номером 12 и ее энерговыделение составило 341,95 кВт, а наиболее энергонапряженной шести-трубной ТВС является сборка с номером 9 энерговыделение которой составило 292,99 кВт. [1]. После произведены гидродинамические и теплофизические расчеты при помощи связанной задачи двух расчетных модулей «ЛОГОС Аэро-Гидро» и «ЛОГОС Тепло».

На основе полученных результатов моделирования получены распределения температурных полей для шести- и восьми- трубной ТВС типа ИРТ-3М.

Проведена верификация созданных моделей, путем сравнения полученных результатов моделирования в ПП «ЛОГОС» с техническое обоснование безопасности эксплуатации исследовательского реактора ИРТ Т НИИ ЯФ при ТПУ [2] и с ранее верифицированными моделями ТВС, полученных в зарубежном ПО «SOLIDWORKS». Максимальное отклонение скорости теплоносителя в межтрубном пространстве для шести-трубной ТВС составило 1,2%, а для восьми-трубной ТВС 3%. Средняя температура нагрева теплоносителя составила для шести-трубной ТВС $5,25 \pm 0,32$ °С, а максимальная температура теплоносителя равна $57,71 \pm 0,34$ °С. Для восьми-трубной ТВС средняя температура нагрева теплоносителя равна $6,06 \pm 0,08$ °С, а максимальная $60,83 \pm 0,05$ °С, что говорит об адекватности полученных моделей ТВС типа ИРТ-3М используемых на исследовательском ядерном реакторе ИРТ-Т.

1. Шкаровский Д.А. Описание применения и инструкция для пользователей программ, собранных из модулей пакета MCU-5. – Москва: МИФИ. 2012 г. – 11 с.– 56 с.
2. Варлачев В.А., Гусаров О.Ф., Заболотнов С.А. и др. Исследовательский ядерный реактор ИРТ-Т. – Томск: Изд-во ТПУ, 2002.

Генетика, биомедицина, биофизика



Подбор промотора для высокой и тканеспецифичной экспрессии генов опсинов

А.А. Аминова^{1,3}, Д.А. Мешалкина¹, В.И. Ну¹, О.Г. Щербакова²

E-mail: aminova.aa@edu.spbstu.ru

¹Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М. Сеченова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

Доступный для исследования опыт лечения заболеваний, связанных с дегенерацией фоторецепторного слоя сетчатки, показывает, что на поздних стадиях большую перспективу имеют оптогенетические методы. В их основе - вирусная доставка генов опсинов или их химер для придания светочувствительности выжившим нейронам, а именно ON-биполярным клеткам или ганглиозным клеткам сетчатки [1,2]. Достаточно высокая и тканеспецифичная экспрессия является важной составляющей оптогенетического протезирования.

Поэтому наша группа поставила цель протестировать в сетчатке мыши специфичный промотор 770En_454P(hGRM6) [3] и сравнить его с убиквитарным промотором CAG, обеспечивающим высокий уровень экспрессии. Данный промотор был создан на основе промотора гена GRM6, который кодирует метаботропный глутаматный рецептор, отвечающий за инициацию каскадного сигнала в ON-биполярных клетках при их деполяризации светом.

Были собраны AAV вектора 770En_454P(hGRM6) и CAG, кодирующие маркерные гены зеленого флуоресцентного белка eGFP и Venus соответственно. Мышам линии C57BL были проведены инъекции полученных векторов в дозе 1,92E10 gc (по 5 животных в группе). Спустя месяц после проведения единичных интравитреальных инъекций были приготовлены препараты глазного бокала и срезов сетчатки для гистологической оценки специфичности промотора. Препараты были окрашены ядерным красителем TO-PRO-3 для локализации слоев сетчатки.

В наших экспериментах CAG промотор обеспечивал высокий уровень экспрессии во всех слоях сетчатки, с наиболее высоким уровнем в слое ганглиозных клеток. Промотор 770En_454P(GRM6) обеспечивал экспрессию не только в единичных ON-биполярных клетках, но и в ганглиозных. Экспрессия маркерного гена в фоторецепторном слое под последним промотором была незначительной.

По результатам проведенной работы, установлено, что промотор 770En_454P(hGRM6) обеспечивает большую специфичность, чем убиквитарный CAG промотор, так как регистрируется меньше экспрессии флуоресцентного белка в клетках фоторецепторов. Однако, эта специфичность не строга в отношении ON-биполярных клеток, и при экспрессии опсинов будут затрагиваться и другие клетки сетчатки, что может привести к затруднению распознавания сигнала.

1 Фирсов М.Л. Перспективы оптогенетического протезирования сетчатки / М.Л. Фирсов // Журнал высшей нервной деятельности им. И.П. Павлова - 2017 Т. 67, № 5, с. 53-62.

2 Marc R, Pfeiffer R, Jones B. Retinal prosthetics, optogenetics, and chemical photoswitches. ACS Chem Neurosci. 2014 Oct 15;5(10):895-901. doi: 10.1021/cn5001233. Epub 2014 Aug 8 PMID: 25089879; PMCID: PMC4210130.

3 Hulliger EC, Hostettler SM, Kleinlogel S. Empowering Retinal Gene Therapy with a Specific Promoter for Human Rod and Cone ON-Bipolar Cells. Mol Ther Methods Clin Dev. 2020 Mar 13; 17:505-519. doi: 10.1016/j.omtm.2020.03.003. PMID: 32258214; PMCID: PMC7114634.

Относительный уровень белка катепсина Д в клетках первичной культуры макрофагов пациентов с *GBA1*-ассоциированной болезнью Паркинсона

*А. В. Артынюк*¹, *А.Э. Копытова*^{1,2}, *М.А. Николаев*^{1,2}, *И.В. Милухина*³, *С.Н. Пчелина*^{1,2}

E-mail: aleksandra.artyniuk@gmail.com

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²ФГБОУ ВО Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. акад. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

³ФГБНУ Институт мозга человека им. Н.П. Бехтеревой Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Мутации в гене *GBA1*, кодирующем лизосомный фермент глюкоцереброзидазу, являются наиболее распространенным генетическим фактором риска болезни Паркинсона (БП) (увеличивают риск БП в 6-7 раз) [1]. Однако не у всех носителей мутации в гене *GBA1* развивается БП в течение жизни. Важным фактором в патогенезе БП является накопление и олигомеризация белка альфа-синуклеина. В деградации альфа-синуклеина принимает участие лизосомная протеаза – катепсин Д. Ранее было показано нарушения функции катепсина Д у пациентов с *GBA1*-ассоциированной БП (*GBA1*-БП). Остается неизвестным, являются ли эти нарушения следствием БП или мутаций в гене *GBA1*.

Целью работы является оценка относительного уровня белка катепсина Д в клетках первичной культуры макрофагов у гетерозиготных носителей мутаций в гене *GBA1* (у пациентов с *GBA1*-БП и бессимптомных носителей с мутацией в гене *GBA1* (*GBA1*-носители)) и спорадической БП (сБП).

У пациентов с *GBA1*- БП (N = 8), *GBA1*-носителей (N = 11), сБП (N = 9) и лиц контрольной группы (N = 10) была выделена моноклеарная фракция из периферической крови с помощью центрифугирования в градиенте фиколла. Для дальнейшей дифференцировки моноклеаров в макрофаги клетки культивировали в среде RPMI 1640 (ПанЭко, Россия), содержащей: 10% FBS (БиолоТ, Россия), 1 % гентамицин (БиолоТ, Россия), 10 нг/мл М-CSF (Biolegend, USA) в течение 5 дней в 5 % CO²-инкубаторе при + 37 °С с ежедневной заменой среды [2]. Относительный уровень катепсина Д оценивался методом вестерн-блоттинга. Содержание белка катепсина Д было нормализовано по общему количеству белка в каждом образце с использованием технологии stain-free. Цифровые изображения были получены с помощью хемилюминесцентной системы ChemiDoc (Bio-Rad, США). Количественная оценка проводилась с помощью программного обеспечения ImageJ.

Относительные уровень про-катепсина Д (48 кДа) был статистически значимо ниже в культивируемых макрофагах *GBA1*-БП $0,27 \pm 0,18$, *GBA1*-носителей $0,28 \pm 0,18$ и сБП $0,26 \pm 0,18$ по сравнению с контрольной группой $0,47 \pm 0,20$ ($p = 0,009$, $p = 0,014$ и $p = 0,028$, соответственно). Относительный уровень зрелого катепсина Д (28 кДа) был также снижен в клетках *GBA1*-БП $0,41 \pm 0,18$, *GBA1*-носителей $0,42 \pm 0,23$ и пациентов с сБП $0,29 \pm 0,17$ по сравнению с контрольной группой $0,63 \pm 0,19$ ($p=0,002$, $p=0,010$ и $p < 0,0001$, соответственно).

Пациенты с БП, как с мутациями в гене *GBA1*, так и со спорадической формой заболевания, характеризуются снижением относительного уровня катепсина Д (про- и зрелой форм). Мутации в гене *GBA1* могут влиять на относительный уровень катепсина Д в клетках первичной культуры макрофагов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема №1023031500037-7-1.6.8;1.6.1;1.6.2;1.6.3)

1. Sidransky E. et al. Multicenter analysis of glucocerebrosidase mutations in Parkinson's disease // N Engl J Med. 2009. V. 361. No. 17 P. 1651-61.
2. Николаев М.А. и соавт. Макрофаги периферической крови человека как модель изучения дисфункции глюкоцереброзидазы // Цитология. – 2018. – Vol. 12. – № 60. – P. 1022–102.

Методика оценки достижения состояния равновесия молекулярной системы по данным молекулярной динамики

Басов В. В.^{1,2}, Титов А. И.¹, Швецов А. В.^{1,2}

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

Молекулярная динамика (МД) — это мощный инструмент компьютерного моделирования, позволяющий отслеживать движение атомов в системе, взаимодействующих друг с другом. Метод МД работает путем решения уравнений движения для каждого атома, что позволяет моделировать изменения системы во времени. Одним из главных преимуществ МД является возможность моделировать системы при заданных температуре и давлении, что делает его идеальным инструментом для изучения биологических систем. Одним из вариантов анализа полученных траекторий МД является определение того, находится ли молекулярная система, такая как белок, ДНК, РНК или любая другая, в состоянии равновесия.

Стабильность молекулярных систем имеет решающее значение для понимания их структуры, функции и динамики. Оценка стабильности молекулярной системы позволяет исследователям предсказывать ее поведение и свойства в различных условиях. Существует множество факторов, которые могут влиять на стабильность молекулярной системы, включая: внутримолекулярные взаимодействия (например, ковалентные связи, водородные связи, ван-дер-ваальсовы взаимодействия), межмолекулярные взаимодействия (например, сольватация, стекинг), температура, давление, рН. По имеющимся данным на данный момент никем не реализована методика оценки

Разработанный программный код предоставляет возможность оценить поведение молекулярных структур в заведомо не стабильных и стабильных условиях. Благодаря построению гистограмм и тепловых карт можно увидеть различие между поведением молекулярных систем в указанных условиях. Программа разрабатывается на основе программного обеспечения GROMACS [1]. Она будет иметь открытый доступ к программному коду, что позволит другим исследователям использовать его для своих исследований по структурной биоинформатике.

1. Abraham, M., Alekseenko, A., Basov, V., Bergh, C., Briand, E., Brown, A., Doijade, M., Fiorin, G., Fleischmann, S., Gorelov, S., Gouaillardet, G., Grey, A., Irrgang, M. E., Jalalypour, F., Jordan, J., Kutzner, C., Lemkul, J. A., Lundborg, M., Merz, P., ... Lindahl, E. (2024). GROMACS 2024.3 Manual (2024.3). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.13457083>, бесплатный пакет программного обеспечения с открытым исходным кодом для высокопроизводительной молекулярной динамики и анализа результатов, 2024.

Моделирование метаболизма радиойода у дойных коров

М.А. Басова, А.С. Снегирев, Г.В. Козьмин

E-mail: maribasova97@mail.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Всероссийский научно-исследовательский институт радиологии и агроэкологии Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Обнинск, Россия

Загрязнение внешней среды в результате аварий реакторного происхождения оказывает негативное воздействие на здоровье сельскохозяйственных животных и безопасность животноводческой продукции. Острый период радиационной аварии сопровождается распространением в окружающей среде радиоактивных изотопов йода и считается наиболее опасным. Органом-мишенью для воздействия радиойода является щитовидная железа (ЩЖ), которая аккумулирует поступающий в организм микроэлемент. Степень воздействия радиоактивного йода на организм животных зависит от содержания в рационе и окружающей среде стабильного изотопа. В условиях йододефицита, который характерен для большей части территории РФ, накопление радиойода в ЩЖ дойных коров может быть существенно выше, чем при нормальном уровне содержания стабильного йода в рационе животных [1]. В связи с данными обстоятельствами возникает необходимость создания математической модели метаболизма радиойода в организме дойных коров для оценки радиационного воздействия на животных, а также разработки систем мониторинга и превентивных мероприятий в сельском хозяйстве.

Структура математической камерной модели метаболизма радиойода определялась на основе результатов исследований закономерностей метаболизма йода и обоснования кинетики накопления и выведения радионуклидов из функционально связанных органов и тканей дойных коров, а также балансовых экспериментов с учётом содержания стабильного йода в суточном рационе [2]. Оценка кинетических параметров модели проводилась путём их варьирования по заданной сетке величин и выбора оптимальных значений на основе сопоставления расчётных и экспериментальных данных. Расчёты выполнялись путём решения системы дифференциальных уравнений, соответствующих структуре принятой модели, с использованием РТС Mathcad Prime.

Было выполнено моделирование различных сценариев поступления радиоактивного йода в организм дойных коров при различных уровнях содержания стабильного йода в рационе. Проведена оценка эффективности йодной профилактики при применении подкормок KI непосредственно в период радиоактивных выпадений и после загрязнения пастбищ. Была решена задача по оценке параметров перехода радиойода из циркулирующей крови в ЩЖ и из крови в вымя с учётом рециклинга в сычуге животных (обратная циркуляция йода из кровеносного русла в содержимое ЖКТ) [3]. Механизм метаболизма йода основан на функционировании натрий-йодного симпортера (NIS). За пределами оптимального содержания стабильного йода в рационе ЩЖ может адаптироваться за счёт регулирования экспрессии гена, отвечающего за продуцирование NIS. В условиях йододефицита (<10 мг/сут) происходит усиление, а в случае избытка йода (>50 мг/сут) – подавление экспрессии гена (Эффект Вольфа-Чайкоффа), что учитывается в математической модели.

1. Радиобиология. Радиационная безопасность сельскохозяйственных животных Под. Ред. В.А. Бударкова и А.С. Зенкина. М.: БИБКМ. 2017. 440 с.
2. Буров Н.И., Антипова Н.Н. Влияние йодида калия на накопление ^{131}I в щитовидной железе коров и овец / В сб. Кинетика обмена, биологическое действие радиоактивных изотопов йода. М.: ИБФ МЗ СССР. 1989. С. 149-156.
3. Joseffson M., Grunditz, T. Ohlsson, Ekblad E. Sodium iodide-symporter: distribution in different mammals and role in entero-thyroid circulation of iodide // Acta Physiol. Scand. 2002. V. 175. P. 129–137.

Полиэлектролитные комплексы на основе полисахаридов в качестве офтальмологических систем доставки дексаметазона

А.Н. Бокатый, Н.В. Дубашинская, Ю.А. Скорик

E-mail: qwezakura@yandex.ru

Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Институт высокомолекулярных соединений, Гатчина, Россия

Разработка пролонгированных глазных лекарственных форм с противовоспалительной активностью в настоящее время является актуальной. Встраивание лекарственных средств в наночастицы различных типов является одним из способов улучшения фармацевтических свойств препаратов (повышение биодоступности, таргетность действия, пролонгация действия, снижение степени и частоты побочных эффектов). Полиэлектролитные комплексы (ПЭК) как носители лекарств характеризуются изменчивостью свойств (размер, заряд, рН или термочувствительность) в зависимости от условий получения (природа и молекулярно-массовые характеристики полимеров; концентрация, рН, порядок смешивания растворов полимеров). Варьируя условия приготовления ПЭК, можно получить наночастицы с требуемым размером, зарядом и профилем высвобождения лекарственных веществ для различных типов применения лекарств.

Цель исследования - изучить кинетику и динамику интерполимерного комплексообразования ПЭК на основе нетоксичных и биосовместимых водорастворимых природных полисахаридов для доставки дексаметазона фосфата (DexP) в офтальмологических целях. В качестве объектов исследования мы выбрали водорастворимое катионное производное хитозана, а именно диэтиламиноэтилхитозан (DEAECS), и полианионы - хондроитинсульфат (CHS), гиалуроновую кислоту (HA) и декстрансульфат (DS). Это наиболее перспективные биополимеры для применения в медицине благодаря их высокой биоразлагаемости и отличной биосовместимости; HA также обладает высоким сродством к рецепторам CD44 и является основным компонентом стекловидного тела глаза [1].

Получена серия полиэлектролитных комплексов, образованных в результате интерполимерных взаимодействий между полианионом HA и поликатионом DEAECS [2], полианионом CHS и поликатионом DEAECS/CS, полианионом DS и поликатионом DEAECS/CS с одновременным включением в комплекс ионов цинка в качестве сшивающего агента. Разработанные ПЭК имели гидродинамический диаметр от 200 до 700 нм и обладали как положительным, так и отрицательным ζ -потенциалом, что позволило рассматривать их в качестве различных систем доставки. Все частицы обладали высокой эффективностью инкапсуляции и высоким содержанием DexP. Разработанные системы доставки DexP характеризовались как отличной мукоадгезией, так и длительным высвобождением препарата (для одних систем около 70% DexP высвобождалось в течение 10 ч, для других - около 60-70% DexP высвобождалось в течение 14 дней). Эксперименты *in vitro* показали, что инкапсуляция DexP в полисахаридные наноносители не снижает его противовоспалительной активности по сравнению со свободным DexP. Таким образом, системы доставки дексаметазона на основе полисахаридов являются перспективными для создания противовоспалительных лекарственных форм с улучшенной фармакологической активностью.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 23-23-00148

1. Bokaty, A.N., Dubashynskaya, N.V., Skorik, Y.A. Chemical modification of hyaluronic acid as a strategy for the development of advanced drug delivery systems, *Carbohydrate Polymers* 2024, 337, 122145
2. Dubashynskaya, N.V.; Bokaty, A.N.; Trulioff, A.S.; Rubinstein, A.A.; Kudryavtsev, I.V.; Skorik, Y.A. Development and Bioactivity of Zinc Sulfate Cross-Linked Polysaccharide Delivery System of Dexamethasone Phosphate. *Pharmaceutics* 2023, 15, 2396.

Диагностика эффективности доставки лекарств в раковые клетки методом гигантского комбинационного рассеяния

М.И. Васильева, Д.А. Назаровская, Н.В. Первушин, Ж.В. Самсонова, Л.А. Осминкина

E-mail: vasileva.mi21@physics.msu.ru

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, МГУ, Москва, Россия

Метод спектроскопии комбинационного рассеяния света (КР) применяется в биомедицине для изучения и диагностики клеток, их метаболитов, лекарственных препаратов и т.п. КР заключается в бесконтактном воздействии электромагнитной волной на исследуемый образец. Каждый химический элемент характеризуется набором частот, присущих только ему, поэтому по частотному спектру рассеянного света можно однозначно определить вещество. [1] Однако само по себе КР слабое, и интенсивности оптического сигнала недостаточно для его однозначной интерпретации.

Повысить чувствительность позволяет явление гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) — это усиление сигнала КР от молекул, адсорбированных на нанощероховатой поверхности благородных металлов, где возникает возбуждение локализованных плазмонов (явление локализованного поверхностного плазмонного резонанса - ЛППР). [2]

Наночастицы на основе пористого кремния (пКНЧ) являются перспективным материалом в наномедицине и могут быть использованы как наноконтейнеры для адресной доставки лекарств, поскольку растворяются до нетоксичной кремниевой кислоты в живом организме. В [3] методом КР продемонстрирована кинетика высвобождения лекарства и биодegradация пКНЧ, загруженных Доксорубицином, в раковых клетках. В настоящей работе ожидалось усиление сигнала КР от загруженного в поры наночастиц лекарства с помощью модификации их поверхности наночастицами золота.

В ходе работы разработана методика изготовления нового композитного материала кремний/золото Au-пКНЧ. Изучены физико-химические свойства полученных наночастиц: их диаметр составил около 200 нм, зета-потенциал -24 мВ. Отработана методика загрузки лекарства (Сунитиниб) в поры Au-пКНЧ. Исследована их цитотоксичность при инкубации с клетками НСТ в течении 24 ч, 50% токсичная доза составила 200 мкг/мл. Изучена биодegradация наночастиц в клетках. Получены рамановские карты распределения наночастиц в клетках, наблюдалось усиление сигнала КР от Сунитиниба и клеточных компонент.

Полученные результаты показывают перспективу и безопасность применения в качестве наноконтейнеров композитных наночастиц Au-пКНЧ для адресной доставки и контроля выхода лекарства в раковых клетках методом КР.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 24-15-00137 <https://rscf.ru/project/24-15-00137/>

1. Новикова В.А., Варжель С.В. // Рассеяние света и его применение в волоконной оптике. Университет ИТМО. 2019. С.13-18, 28-30.
2. J.-H. Park, et al. // Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications. Nature Materials. 2009. V. 8. P. 331-336.
3. P.V. Maximchik, et al. // Biodegradable Porous Silicon Nanocontainers as an Effective Drug Carrier for Regulation of the Tumor Cell Death Pathways. ACS Biomater Sci Eng. 2019. V. 5(11). P. 6063-6071.

Влияние модификаторов липидных мембран на порообразующую активность эхинокандинов

Е.В. Водопьянова, А.И. Малыгина, С.С. Ефимова, О.С. Остроумова

E-mail: ket08_02@mail.ru

Институт Цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

Эхинокандины (ЭК) являются одним из наиболее эффективных классов антимикотических препаратов. Они подавляют активность бета-1,3-глюкан-синтазы, нарушая синтез клеточной стенки [1]. Также в последние годы появляется все больше сведений о потенциальной способности ЭК взаимодействовать непосредственно с клеточными мембранами и влиять на их свойства. Исследование мембранной активности ЭК, вероятно, позволит создать более эффективные формы лекарственных препаратов, мишенью для которых, помимо бета-1,3-глюкан-синтазы, будут выступать мембраны клеток.

Для анализа влияния на порообразующую активность ЭК — анидулафунгина (АНФ), каспофунгина (КСФ) и микафунгина (МКФ) — были использованы следующие модификаторы: флоретин, RH421 и 1-лизо-2-ацил-sn-глицеро-3-фосфохолин (ЛФХ). Влияние выбранных модификаторов на свойства мембран различно, что позволяет описать вклад каждого из них в порообразующую активность ЭК. Так, ЛФХ увеличивает положительную кривизну мембраны [2], флоретин понижает, а RH421 повышает дипольный потенциал [3, 4]. В работе был использован электрофизиологический метод регистрации токов, протекающих через плоские липидные бислои в режиме фиксации потенциала. Мембраны формировали по методу Монтала и Мюллера [5] из 1-пальмитоил-2-олеил-sn-глицеро-3-фосфохолин и эргостерина в молярном соотношении 2:1 в растворах с шестикратным градиентом электролита. АНФ, КСФ и МКФ добавляли с одной стороны мембраны в концентрациях 10-30 мкМ, вызывающих мультиканальную активность ЭК. После достижения стационарного значения трансмембранного ЭК-индуцированного тока, в оба отсека камеры добавляли модификаторы в концентрациях 7.5 мкМ (ЛФХ и RH421) и 20 мкМ (флоретин).

Было обнаружено, что введение ЛФХ вызывает увеличение тока, индуцированного АНФ, КСФ и МКФ в 7, 6.5 и 11 раз, соответственно, тогда как RH421 не влияет на активность всех протестированных ЭК. Добавление флоретина приводит к увеличению МКФ-индуцированного тока в 11 раз, тогда как порообразующая активность АНФ и КСФ не изменяется. Сравнение способности влияния дипольных модификаторов на дипольный потенциал мембраны и их влияния на мембранную активность ЭК показывает, что вклад дипольного потенциала в порообразующую активность ЭК не обнаружен. При этом использование ЛФХ, потенцирующего порообразующую активность ЭК, позволяет думать, что положительная кривизна мембраны играет ключевую роль в способности ЭК формировать поры.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-74-10023.

1. Perlin D.S. Mechanisms of Echinocandin Antifungal Drug Resistance // *Annals of the New York Academy of Science*. 2015. V. 1354. No. 1.
2. Fueller N., Rand R.P. The Influence of Lysolipids on the Spontaneous Curvature and Bending Elasticity of Phospholipid Membranes // *Biophysical Journal*. 2001. V. 81. No. 1. P. 243-254.
3. Ostroumova O.S., Efimova S.S., Schagina L.V. Phloretin-Induced Reduction of Sterol-Containing Bilayers // *The Journal of Membrane Biology*. 2013. V. 246. P. 985-991.
4. Duffin R. L., Garret M.P., Busath D.D. Modulation of Lipid Bilayer Interfacial Dipole Potential by Phloretin, RH421, and 6-ketocholestanol as Probed by Gramicidin Channel Conductance // *Langmuir*. 2003. V. 19. No. 4. P. 1439-1442
5. Montal M., Mueller P. Formation of Biomolecular Membranes from Lipid Monolayers and a Study of Their Electrical Properties // *PNAS*. 1972. V. 69. No. 12. P. 3561-3566.

Характеристика рекомбинантного белка альфа-амилазы из *Bacillus sp.*, продуцируемого в штамме *Saccharomyces cerevisiae*

Д.А. Головкина^{1,2}, А.Е. Климцева^{1,3}, Бобров К.С.^{1,2}, С.А. Корбан^{1,2}, В.Т. Пешехонов^{1,2},
В.Г. Королев^{1,2}, Т.А. Евстюхина^{1,2}, А.А. Кульминская^{1,2}

E-mail: golovkina_da@npri.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина, Россия

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

Альфа-амилаза является одним из наиболее ценных и значимых ферментов, используемых в промышленности. Альфа-амилазы (КФ 3.2.1.1) – ферменты, катализирующие гидролиз α -1,4-d-глюкозидных связей в полисахаридной цепи крахмала и гликогена до олигосахаридов различной длины. Альфа-амилазы применяют в пивоварении, хлебопечении, производстве сахара, спиртных напитков и моющих средств, а также они практически полностью заменили собой химический гидролиз в крахмалоперерабатывающей промышленности. Для удовлетворения растущего спроса производств на ферментные препараты необходимо искать новые безопасные штаммы-продуценты. Стратегией увеличения производства альфа-амилазы может стать использование эффективных систем экспрессии, обеспечивающих высокую продуктивность фермента. Для этих целей активно используют дрожжи *Saccharomyces cerevisiae*, способных производить рекомбинантные белки в промышленных масштабах [1].

Исследователями из НИЦ «Курчатовского институт» – ПИЯФ с помощью генетических манипуляций был создан штамм *S. cerevisiae* КЕР1/pYES2-Amy – продуцент альфа-амилазы из *Bacillus sp.* НЗ с регулируемой мутабельностью. Полученный штамм КЕР1/pYES2-Amy, как наиболее перспективный, при культивировании на селективной, крахмалсодержащей, питательной среде растет исключительно медленно и при этом с высокой скоростью мутирует, что позволяет производить эффективный отбор целевых вариантов с необходимыми свойствами [2].

Для улучшения секреции альфа-амилазы генно-модифицированными дрожжами был проведен 4-х ступенчатый отбор мутантов, способных расти на селективной среде. В результате был получен клон, амилазная активность которого повысилась в 30 раз по сравнению с исходным штаммом. Кроме того, была осуществлена оптимизация параметров культивирования дрожжей (состав среды и время роста). Наиболее оптимальным источником углерода оказался глицерин, максимальная удельная активность рекомбинантной альфа-амилазы наблюдалась на 3-и сутки. А также, были проанализированы биохимические параметры фермента: рН- и температурный оптимумы.

Работа выполняется при финансовой поддержке «Курчатовского геномного центра – ПИЯФ» программой развития центров генетических исследований мирового уровня, Соглашение No. 075-15-2019-1663.

1. Mattanivich D., Branduardi P., Dato L. et al. Recombinant protein production in yeasts // *Methods in molecular biology*. 2012. V.824. P. 329-358.
2. Кульминская А.А., Королев В.Г., Евстюхина Т.А., Бобров К.С., Пешехонов В.Т., Корбан С.А., Энейская Е.В. // Рекомбинантная плазмида для экспрессии альфа-амилазы из *Bacillus sp.* НЗ и штамм дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* - продуцент альфа-амилазы из *Bacillus sp.* НЗ, обладающий регулируемой мутабельностью. Заявка № 2023131758 на патент от 29.11.2023 г.

Применение фуллеренолов способствует снижению уровня окислительного стресса в модели болезни Гентингтона на *Drosophila melanogaster*

И.М. Голомидов, О.И. Большакова, А.Е. Комиссаров, С.В. Саранцева

E-mail: ilia_stv@mail.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Болезнь Гентингтона (БГ) – нейродегенеративное заболевание с аутосомно-доминантным типом наследования, развивающееся вследствие экспансии тринуклеотидных CAG повторов (36 и более) в первом экзоне гена HTT, что приводит к патологическому удлинению полиглутаминового тракта (PolyQ) в составе белка гентингина. Считается, что мутантная форма гентингина приводит к формированию патологических связей с рядом белков и факторов транскрипции, агрегации амилоидогенных белковых комплексов в ядре и цитоплазме, нарушению регуляции аутофагии, а также индукции митохондриальных нарушений и апоптоза [1]. Окислительный стресс (ОС) является одним из важных факторов патогенеза БГ. Его негативная роль была описана как при исследованиях пациентов с БГ, так и в различных экспериментальных моделях. Поэтому изучение роли ОС и поиск эффективных антиоксидантов являются ключевыми факторами для разработки комплексной терапии БГ.

Фуллерены и их производные являются мощными антиоксидантами, активность которых была экспериментально подтверждена в целом ряде исследований. Более того, было показано, что фуллерены предотвращают агрегацию амилоидных белков.

Целью данной работы являлось исследование влияния фуллеренолов $C_{60}(OH)_{30}$ и $C_{120}O(OH)_{44}$, полученных в Петербургском институте ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», на уровень ОС в модели БГ на *Drosophila melanogaster*.

Характерными чертами БГ являются сокращение продолжительности жизни и развитие двигательных нарушений. Для моделирования БГ на *Drosophila melanogaster* мы активировали нейрон-специфическую экспрессию гена HTT с нормальным (HTT.16Q) и увеличенным (HTT.128Q) количеством CAG триплетов с использованием бинарной системы GAL4/UAS. Продолжительность жизни дрозофил с экспрессией гена HTT.128Q сократилась более чем вдвое по сравнению с мухами, экспрессирующими нормальный вариант гена HTT.16Q. Далее, мы оценили уровень АФК в мозге мух с экспрессией гена HTT.128Q при помощи H_2DCFDA и обнаружили, что уровень АФК в мозге 15-дневных и 25-дневных мух с экспрессией гена HTT.128Q был значительно выше по сравнению с мухами, экспрессирующими ген HTT.16Q. При этом, содержание дрозофил с экспрессией гена HTT.128Q на среде, включающей фуллеренолы ($C_{60}(OH)_{30}$ в дозе 0,2 мг/мл или $C_{120}O(OH)_{44}$ в дозе 0,01 мг/мл), приводило к значительному снижению уровня АФК как на 15-ый, так и 25-ый день жизни мух [2].

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500037-7-1.6.8;1.6.1;1.6.2;1.6.3 Изучение молекулярных и клеточных компонентов патогенеза социально-значимых заболеваний для разработки методов ранней диагностики и лечения).

1. Иллариошкин С.Н. и др. Молекулярный патогенез болезни Гентингтона // Биохимия. 2018. Т. 83, № 9. С. 1299–1310.
2. Bolshakova O.I. et al. Fullerenols Prevent Neuron Death and Reduce Oxidative Stress in *Drosophila* Huntington's Disease Model // Cells. 2022. V. 12, № 1: 170.

Разработка подхода к выбору оптимального полимера-носителя для создания твёрдых дисперсий биологически активных веществ растительного происхождения методом экструзии горячего расплава

А.А. Данилова¹, К.А. Гусев¹, Д.Н. Маймистов¹, Е.В. Флисюк¹

E-mail: shmarova.aleksandra@pharminnotech.com

¹ФГБОУ ВО Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет Минздрава России

Одной из перспективных стратегией увеличения растворимости и биодоступности флавоноидов является технология твёрдых дисперсных систем (ТДС), полученных методом экструзии горячего расплава (ЭГР) [1]. Инкорпорирование активного вещества в полимерную матрицу с последующим сплавлением позволяет перевести кристаллические субстанции в аморфную форму, которая обладает улучшенными физико-химическими и фармакокинетическими параметрами. Важной задачей в данном случае является подбор оптимального полимера-носителя, позволяющего предотвратить термическую деградацию активной субстанции в ходе ЭГР и обеспечить надлежащий профиль растворения полученной ТДС в средах желудочно-кишечного тракта. Данный аспект в большинстве исследований освещён неполно.

Цель работы – разработка подхода к выбору оптимальных полимеров-носителей для создания твёрдых дисперсий плохо растворимых субстанций флавоноидов (на примере диосмина и кверцетина) методом ЭГР. В качестве кандидатов для изучения фазовой растворимости выбраны сополимер поливинилпирролидона с винилацетатом 60:40 VIVAPHARM PVPVA64 (ПВПВА, JRS Pharma), привитой сополимер поливинилкапролактама поливинилацетат-полиэтиленгликоля Soluplus® (BASF), поливинилпирролидоны марок Kollidon 17 PF (K17, BASF), Kollidon 25 (K25, BASF) и VIVAPHARM PVP K90 (K90, JRS Pharma), поливиниловый спирт (ПВС), поллоксамер (Kolliphor ® P188, BASF), полиэтиленгликоль (ПЭГ) 6000.

Для разработки подхода мы использовали модификацию метода, предложенного Хиггучи и Коннорсом [2]. Точные навески активных субстанций помещались в мини-пробирки объемом 2 мл и заливались предварительно подготовленными водными растворами полимеров с различной концентрацией (1%, 2,5%, 5% и 10%). Далее пробирки закупоривали и встряхивали в течении 48 часов в условиях непрерывного перемешивания (200 об/мин) и температуры $25 \pm 2^\circ\text{C}$. Далее образцы центрифугировали при скорости 10000 об/мин, отбирали супернатант для последующей фильтрации с помощью шприцевого фильтра 0,45 мкм PES AGILENT (Agilent Technologies Inc, США) и количественного определения растворимости методом УФ-спектрофотометрии.

Зависимость величины растворимости активных соединений от концентрации водных растворов полимеров во всех случаях описывалась линейной регрессионной моделью. Для кверцетина наиболее оптимальным носителем оказался ПВПВА (константа фазовой стабильности (K_s) = 7400; $R^2 = 0,9943$). В случае диосмина наибольшую эффективность показал поливинилпирролидон K17 ($K_s = 6151$; $R^2 = 0,9962$). Кроме того, низкие температуры стеклования и выраженные гидрофильные свойства выбранных полимеров подтверждают возможность их дальнейшего использования в разработке технологии получения твёрдых дисперсных систем флавоноидов методом экструзии горячего расплава.

Работа выполнена на базе Центра коллективного пользования (ЦКП) «Аналитический центр ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России».

1. Kandemir K. et al. Recent advances on the improvement of quercetin bioavailability //Trends in Food Science & Technology. – 2022. – Т. 119. – С. 192-200. DOI: 10.1016/j.tifs.2021.11.032.
2. Higuchi T. K., Connors A. Phase-solubility techniques. – 1965. – No 4. – P. 117-212.

ИЭМ-1460 повышает интенсивность эпилептической активности в энторинальной коре мышей *in vitro*

Ю.Л. Ергина¹, М.О. Грязнова¹, Д.В. Амахин¹, А.Т. Трофимова², А.В. Зайцев¹.

E-mail: julia.ergina@gmail.com

¹Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М. Сеченова РАН, Санкт-Петербург, Россия

²Университет Саскачевана, Саскатун, Канада

Тормозные интернейроны, и в особенности быстроразряжающиеся интернейроны, координируют активность возбуждающих нейронов и, таким образом, вносят значительный вклад в генерацию эпилептической активности [1]. Модуляция активности интернейронов является перспективным экспериментальным способом воздействия на эпилептическую активность. В мозге взрослых грызунов Ca^{2+} -проницаемые AMPA-рецепторы (КП-AMPA-рецепторы) преимущественно экспрессируются на постсинаптической мембране тормозных интернейронов [2], что создает теоретическую возможность селективного фармакологического воздействия на эту группу клеток.

Целью нашей работы было проверить, как ИЭМ-1460, специфический блокатор КП-AMPA-рецепторов, влияет на интенсивность эпилептоподобной активности, вызываемой в энторинальной коре мозга взрослых мышей *in vitro*.

Исследование выполнялось на горизонтальных переживающих срезах мозга самцов мышей линии C57BL/6. Методом пэтч-кламп в конфигурации целая клетка регистрировалась эпилептоподобная активность возбуждающих и тормозных нейронов глубоких слоев энторинальной коры. Для вызова эпилептоподобной активности использовался перфузирующий раствор следующего состава: 125 NaCl, 3,5 KCl, 1,25 NaH_2PO_4 , 0,25 $MgSO_4$, 2 $CaCl_2$, 24 $NaHCO_3$, 13,32 D-глюкозы и 0,1 4-аминопиридина (в ммоль/л). Для блокады КП-AMPA-рецепторов использовался блокатор ИЭМ-1460 (100 мкМ/л), добавляемый одновременно с подачей проэпилептического раствора.

Регистрируя активность как тормозных, так и возбуждающих нейронов, мы отметили, что быстроразряжающиеся тормозные нейроны активно генерируют потенциалы действия до появления первого иктального разряда и в межиктальный период, тогда как возбуждающие нейроны в это время малоактивны. Эксперименты по одновременной регистрации двух типов нейронов показали, что и возбуждающие, и тормозные нейроны активно вовлечены в генерацию иктальных разрядов. В присутствии ИЭМ-1460 не менялось ни время появления первых потенциалов действия, ни время появления первых спонтанных интериктальных событий, регистрируемых от быстроразряжающихся тормозных нейронов. В то же время, в период, предшествующий генерации первого иктального разряда, увеличивалась частота крупных интериктальных разрядов, регистрируемых от быстроразряжающихся тормозных нейронов. Что касается иктальной активности, ИЭМ-1460 не повлиял ни на число, ни на время появления иктальных разрядов, наблюдаемых в течение 20 минут после подачи проэпилептического раствора, но при этом увеличил продолжительность иктальной активности.

Таким образом, специфический блокатор КП-AMPA-рецепторов ИЭМ-1460 увеличил интенсивность эпилептоподобной активности в энторинальной коре взрослых мышей *in vitro*, что может быть связано с его селективным воздействием на тормозные интернейроны.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект 23-25-00427.

1. Sohal V.S., Zhang F., Yizhar O., Deisseroth K. Parvalbumin neurons and gamma rhythms enhance cortical circuit performance. // Nature. 2009. Т. 459(7247). P. 698-702.
2. Zinchenko V.P., Gaidin S.G., Teplov I.Y., Kosenkov A.M., Sergeev A.I., Dolgacheva L.P., Tuleuhanov S.T. Visualization, properties, and functions of GABAergic hippocampal neurons containing calcium-permeable Kainate and AMPA receptors. // Biochem. Moscow Suppl. Ser. A. 2020. Т. 14. P. 44-53.

Уровень альфа-синуклеина в эритроцитах периферической крови при синуклеинопатиях

*А.С. Журавлев¹, Л.А. Мультатули¹, А.Э. Копытова¹, А.О.Лавринова¹, В.Н. Пидюрчина¹,
Е.А. Демидова¹, И.В. Милюхина², О.А. Беркович³, С.Н. Пчелин¹, А.К. Емельянов¹*

E-mail: zhuravlev_as@pnpi.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Институт мозга человека им. Н.П. Бехтеревой РАН, Санкт-Петербург, Россия

³Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. акад. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

Синуклеинопатии — это группа нейродегенеративных заболеваний, характеризующаяся накоплением нерастворимых агрегатов белка альфа-синуклеина в селективных популяциях нейронов и клетках глии. Роль данного белка в патогенезе синуклеинопатий многократно показана. Обнаружено, что помимо головного мозга альфа-синуклеин также содержится в клетках крови, из которых на долю эритроцитов приходится до 98% альфа-синуклеина [1].

Целью исследования являлась оценка уровня олигомерного и общего альфа-синуклеина в нерастворимой белковой фракции лизатов эритроцитов периферической крови пациентов с болезнью Паркинсона (БП) и пациентов с мультисистемной атрофией (МСА) и его ассоциация с показателями клинического анализа крови. В исследование были включены группа пациентов с БП (N=35, средний возраст $61,2 \pm 11,6$ лет, 13 м.), группа пациентов с МСА (N=14, средний возраст $60,0 \pm 5,5$ лет, 6 м.), а также группа здорового контроля (N=21, средний возраст $56,9 \pm 13,6$ лет). Собранные эритроциты были подвергнуты ультрацентрифугированию с использованием настольной ультрацентрифуги Optima MAX-XP (Beckman Coulter, США) с последующей инкубацией полученного осадка в TBS-SDS-Urea буфере в течение 1 часа при 56°C . Оценка относительного уровня олигомерного и общего альфа-синуклеина проводилась с использованием метода дот-блоттинга на приборе Bio-Dot Microfiltration Apparatus (Bio-Rad, США) в нерастворимой белковой фракции эритроцитов периферической крови пациентов с использованием двух разных первичных антител (5G4 (1:9000, Millipore, США) и Purified Mouse Anti- α -Synuclein(1:9000, BD Bioscience, США)), соответственно.

В результате проведенного нами исследования полученных с использованием ультрацентрифугирования лизатов эритроцитов периферической крови согласно модифицированной описанной ранее методике [2] статистически значимых различий в относительном уровне олигомерного и общего альфа-синуклеина при сравнении групп пациентов с БП и МСА, БП и контроля, МСА и контроля между собой обнаружено не было ($p>0,05$). Корреляции относительного уровня олигомерного и общего альфа-синуклеина с показателями клинического анализа крови (уровень гемоглобина, средняя концентрация гемоглобина в эритроците, количество эритроцитов, тромбоцитов, лейкоцитов) обнаружено не было ($p>0,05$).

Таким образом, можно предположить, что БП и МСА характеризуются отсутствием изменений уровня олигомерного и общего альфа-синуклеина в нерастворимой белковой фракции эритроцитов периферической крови по сравнению с индивидуумами контрольной группы при их оценке методом дот-блоттинга.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №24-25-00397.

1. Barbour, R. Red blood cells are the major source of alpha-synuclein in blood / R. Barbour, K. Kling, J. P. Anderson [et al.] // Neuro-Degenerative Diseases. – 2008. – Т. 5. – № 2. – С. 55-59.
2. Golomidov, I. M. Reduction of the α -synuclein expression promotes slowing down early neuropathology development in the Drosophila model of Parkinson's disease / I. M. Golomidov, E. M. Latypova, E. V. Ryabova [et al.] // Journal of Neurogenetics. – 2022. – V. 36. – № 1. – P. 1-10.

Создание системы экспрессии пластик-деградирующих ферментов

Д.Н. Иванова^{1,2}, С.А. Корбан^{1,3}, К.С. Бобров^{1,3}, А.А. Кульминская^{1,3}

E-mail: ivanova_dn@pnri.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

²Санкт-Петербургский государственный технологический университет – СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

³Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Огромное количество пластиковых материалов, содержащих ПЭТ, уже накопилось в окружающей среде, создавая серьезные экологические проблемы. Альтернативой агрессивным методам утилизации пластиковых отходов является использование пластик-деградирующих ферментов (ПЭТаз), которые относятся к группе эстераз, катализирующих гидролиз сложных карбоновых эфиров [1, 2].

Целью данной работы является поиск новых продуцентов пластик-деградирующих ферментов и создание системы их экспрессии.

Для решения этой задачи были отобраны пробы пластика из почвы на территории Ленинградской области. Скрининг продуцентов таких ферментов был осуществлен с использованием селективной среды, содержащей поликапролактон, представляющий собой удобный модельный субстрат для подобных ферментов. Наличие целевой ферментативной активности определяли по появлению прозрачной зоны вокруг колоний.

Бактерия, проявившая максимальную скорость увеличения размера зоны деградации поликапролактона, была выращена в жидкой среде для выделения геномной ДНК. Анализ нуклеотидной последовательности гена 16S рибосомальной РНК позволил идентифицировать данную бактерию как *Pseudomonas* sp. С помощью алгоритма tBLASTn было произведено сравнение последовательностей известных ПЭТаз с геномом *Pseudomonas* sp., которое выявило наличие потенциального гена ПЭТаз (обозначенного далее, как *NODE3*). Ген был клонирован в вектор **pET-24d(+)** и создана система экспрессии гена *NODE3* на основе клеток *E. coli* штамм BL21(DE3).

Было показано, что белок *NODE3* нарабатывается в клетках в виде бактериальных тел включения. Для получения растворимого белка *NODE3* произведено клонирование гена данного белка в вектор pET-22b(+), содержащий сигнальную последовательность для экспрессии белка в периплазматическое пространство клеток. Проведен ПЦР-скрининг бактериальных колоний на наличие вставки. Проводится проверка активности фермента.

Работы выполняются при финансовой поддержке «Курчатовского геномного центра - ПИЯФ» программой развития центров генетических исследований мирового уровня, Соглашение № 075-15-2019-1663.

1. Maity W, Maity S, Bera S, Roy A. Emerging Roles of PETase and MHETase in the Biodegradation of Plastic Wastes. Appl Biochem Biotechnol. 2021 Aug;193(8):2699-2716.
2. Yoshida S, Hiraga K, Takehana T, Taniguchi I, Yamaji H, Maeda Y, et al. (March 2016). "A bacterium that degrades and assimilates poly (ethylene terephthalate)". Science. 351 (6278): 1196–9. Bibcode:2016Sci...351.1196Y.

Ген *swiss cheese Drosophila melanogaster* важен для нормального функционирования репродуктивной системы самцов

Е.А. Иванова, Е.В. Рябова, Е.М. Латыпова, С.В. Саранцева

E-mail: ivanova_ea@npri.nrcki.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Продукт гена *PNPLA6* принадлежит к семейству гидролаз, которые реагируют с различными субстратами: фосфолипиды, триацилглицериды и сложные эфиры ретинола. Данный фермент предпочтительно гидролизует фосфатидилхолин до лизофосфатидилхолина или глицерофосфохолина, тем самым выполняя функции фосфолипазы В. Нарушения нормального функционирования данного гена приводят к избыточному накоплению фосфолипидов, что является причиной развития различных заболеваний.

Ген *PNPLA6* является эволюционно-консервативным, в частности его ортолог у плодовой мушки *Drosophila melanogaster* – ген *swiss cheese (sws)*. Ярким фенотипическим проявлением у мух с мутацией по данному гену является прогрессирующая с возрастом нейродегенерация, а также появление глиальных aberrантных структур вокруг аксонов в мозге, что является причиной нарушения двигательной активности и преждевременной гибели мух [1, 2].

Экспрессия гена *sws* была проанализирована на разных стадиях онтогенеза дрозофилы, в частности она наблюдалась в слюнных железах, среднем кишечнике, жировом теле, мальпигиевых сосудах, репродуктивной системе самцов [3]. Непосредственно в семенниках самцов экспрессия была обнаружена в соматических клетках цистах, главной функцией которых является образование физического барьера для защиты развивающихся зародышевых клеток от среды организма (гематотестикулярного барьера). Также было отмечено, что у самцов, мутантных по гену *sws (sws^l)*, снижена скорость движения сперматозоидов, что, возможно, указывает на важность правильного функционирования данного гена для нормальной работы репродуктивной системы.

В данной работе было проведено исследование состояния репродуктивной системы самцов с мутацией в гене *sws*. Было отмечено нарушение целостности гематотестикулярного барьера в цистах ранних и поздних сперматид, а также процесса индивидуализации сперматид, из-за чего образовывалось небольшое количество функциональных сперматозоидов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500037-7-1.6.8;1.6.1;1.6.2;1.6.3 Изучение молекулярных и клеточных компонентов патогенеза социально-значимых заболеваний для разработки методов ранней диагностики и лечения)

1. Ryabova E.V. et al. Morpho-Functional Consequences of Swiss Cheese Knockdown in Glia of *Drosophila melanogaster* // *Cells*. 2021. V. 10. №. 3. P. 529–548.
2. Melentev P.A. et al. Loss of *swiss cheese* in Neurons Contributes to Neurodegeneration with Mitochondria Abnormalities, Reactive Oxygen Species Acceleration and Accumulation of Lipid Droplets in *Drosophila* Brain // *International Journal of Molecular Sciences*. 2021. V. 22. №. 15. P. 8275–8303.
3. Melentev P.A. et al. *Drosophila* Lysophospholipase Gene *swiss cheese* Is Required for Survival and Reproduction // *Insects*. 2022. V. 13. №. 1. P. 14–35.

УДК: 577.2

Дозозависимое влияние селективного ингибитора STING на активность лизосомных гидролаз и концентрацию лизосфинголипидов в первичной культуре макрофагов периферической крови человека

Е.С. Калугина¹, А.И. Безрукова^{1,2}, К.С. Башарова^{1,2}, Байдакова Г.В.³, Захарова Е.Ю.³, Пчелина С.Н.^{1,2}, Усенко Т.С.^{1,2}

E-mail: elenapashkova19@yandex.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. акад. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

³Медико-генетический научный центр им. акад. Н.П. Бочкова, Москва, Россия

Молекулярные механизмы распространённого нейродегенеративного заболевания, болезни Паркинсона (БП), в основе патогенеза которой лежит накопление белка альфа-синуклеина, не известны. Предполагается, что дисфункция лизосом и процессов аутофагии, посредством которой деградирует альфа-синуклеин, может играть ключевую роль при БП. Стимулятор генов интерферона (stimulator of interferon genes (*STING*)), кодирующий трансмембранный белок TMEM173, регулирует множество процессов в клетке, в том числе аутофагию, представляя собой неканонический регулятор аутофагии. Однако, влияние ингибирования *STING* на биохимические параметры лизосомных гидролаз, активность которых меняется при БП [1,2], ранее не оценивалась. Цель исследования заключалась в оценке дозозависимого влияния селективного ингибитора *STING* – Н-151 в первичной культуре макрофагов периферической крови (ПКМПК) человека на активность лизосомных гидролаз и концентрацию лизосфинголипидов.

Активности ферментов (глюкоцереброзидаза (GCase), галактозилцереброзидаза (GALC), альфа-галактозидаза (GLA), кислая сфингомиелиназа (ASMase)) и концентрации сфинголипидов (гексозилсфингозин (HexSph), глоботриаозилсфингозин (LysoGb3), сфингомиелин (LysoSM)) оценивали в ПКМПК, полученной от 6 неврологически здоровых индивидуумов и культивируемой в присутствии ингибитора Н-151 в концентрациях 0.25, 0.50, 1, 2 мкМ, методом высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией. Выживаемость первичной культуры в присутствии Н-151 оценивали коммерческим набором MTT Cell Proliferation and Cytotoxicity Assay Kit (Servicebio). Эффективность ингибирования Н-151 оценивали по уровню белков TMEM173 и субстрата белка TMEM173 - phospho-TBK1 (Ser172) методом вестерн-блоттинга.

В ходе оценки дозозависимого влияния селективного ингибитора *STING* Н-151 на активность лизосомных гидролаз GCase, GALC, GLA, ASMase и концентрацию лизосфинголипидов HexSph, LysoGb3, LysoSM в ПКМПК неврологически здоровых индивидуумов нами не было выявлено статистически значимых различий при воздействии ингибитора Н-151 в концентрациях 0.25, 0.50, 1, 2 мкМ по сравнению с необработанной культурой клеток ($p > 0.05$).

Впервые показано, что ингибирование активности *STING* не оказывает влияния на активность лизосомных гидролаз и концентрацию лизосфинголипидов в ПКМПК неврологически здоровых индивидуумов, что делает возможным индукцию аутофагии без выраженного влияния на изменение лизосомного биогенеза. Необходимы дальнейшие исследования по оценке влияния ингибитора *STING* на процессы аутофагии на пациент-специфичных клетках с целью оценки их потенциального эффекта для терапии БП.

Исследование поддержано грантом РФФ 24-25-00212.

1. Usenko T.S. et al. Impaired Sphingolipid Hydrolase Activities in Dementia with Lewy Bodies and Multiple System Atrophy//Mol Neurobiol. 2022 V. 10. No. 10. P. s12035.
2. Usenko T.S. et al. LRRK2 exonic variants are associated with lysosomal hydrolase activities and lysosphingolipid alterations in Parkinson's disease//Gene. 2023 V. 10. No. 10. P. j.gene.2023.147639.

Acute effects of medium-chain triglycerides on metabolite levels, neuroplasticity, and monoamine levels in male Wistar rats

E.A. Kim^{1,3}, V.A. Nikitina¹, A.P. Schwarz², D.S. Traktirov¹, S.A. Apyatin¹, M.N. Karpenko¹, D.U. Krytskaya¹, V.M. Klimenko¹, K.P. Shcherbakova¹, A.N. Trofimov¹

E-mail: kim_liza@icloud.com

¹*Institute of Experimental Medicine;*

²*Sechenov Institute of Evolutionary Physiology and Biochemistry of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia*

³*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia*

Medium-chain triglycerides (MCTs) are widely recognized for their ability to induce ketosis, as well as their neuroprotective and procognitive properties. By providing an alternative energy substrate to the brain, MCT supplementation can produce rapid metabolic changes even in the presence of carbohydrates [1]. Previous studies have demonstrated that chronic MCT supplementation over 28 days induces procognitive effects without significant long-term metabolic changes [2]. This suggests that the cognitive benefits may be mediated by acute metabolic alterations induced by intermittent ketosis following MCT administration. Therefore, understanding these immediate effects is crucial for revealing the mechanisms underlying their cognitive benefits and could contribute to the development of novel therapeutic strategies for neurological disorders.

In this study, we aimed to evaluate the acute impact of MCT oil on metabolic health markers, cytokines, and neuroplasticity-related gene expression in male Wistar rats. Male Wistar rats received a single oral dose of MCT oil (3 g/kg). Blood samples were collected at multiple time points (0, 30, 60, 120, and 180 minutes) to analyze metabolites and cytokines. Dopamine and serotonin metabolism in the striatum was assessed via high-performance liquid chromatography (HPLC). Neuroplasticity-related gene expression in the medial prefrontal cortex (mPFC), dorsal hippocampus (DH), and ventral hippocampus (VH) was analyzed using reverse transcription quantitative polymerase chain reaction (RT-qPCR).

The levels of β -hydroxybutyrate (BHB) increased at 30 minutes, peaked at 120 minutes, and decreased by 180 minutes, while glucose levels decreased at 30 and 120 minutes. Cytokine analysis showed decreased interleukin-2 (IL-2) and increased leptin and regulated on activation, normal T cell expressed and secreted (RANTES) levels. Neuroplasticity markers such as matrix metalloproteinase 9 (Mmp9), fibroblast growth factor 2 (Fgf2), and glutamate receptor subunits (GluN) were upregulated in the mPFC, DH, and VH at 180 minutes. Monoamine levels in the striatum remained largely unchanged, except for a transient increase in the homovanillic acid/dihydroxyphenylacetic acid (HVA/DOPAC) ratio at 30 minutes.

1. Shcherbakova, K., Schwarz, A., Apyatin, S., Karpenko, M., & Trofimov, A. (2022). Supplementation of Regular Diet With Medium-Chain Triglycerides for Procognitive Effects: A Narrative Review. *Frontiers in Nutrition*, 9, 934497. <https://doi.org/10.3389/fnut.2022.934497>.
2. Shcherbakova, K., Schwarz, A., Ivleva, I., Nikitina, V., Krytskaya, D., Apyatin, S., Karpenko, M., & Trofimov, A. (2023). Short- and long-term cognitive and metabolic effects of medium-chain triglyceride supplementation in rats. *Heliyon*, 9(2), e13446. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e13446>.

Методы анализа функциональных связей головного мозга человека

Д. А. Ковалишина

E-mail: kovalishina_da@nrcki.ru

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Разработка модели функционирования головного мозга представляет собой актуальную и современную задачу [1]. Одним из вариантов построения такой модели может быть анализ связи между областями головного мозга. Такой подход получил название коннектометрии. В литературе описаны различные метрики описания коннектома [2], однако продолжается поиск оптимальных метрик и их комбинаций, так как искомая структура коннектома головного мозга неизвестна.

В данной работе был проведен анализ методов для разработки модели головного мозга человека на примере данных функциональной магнитно-резонансной томографии (фМРТ) в состоянии покоя.

Регистрация данных фМРТ проводилась на томографе GE Signa Premier 3T со следующими параметрами сканирования: TR (время повторения) - 1300 мс, TE (эхо-время) - 30 мс, угол отклонения - 90 градусов, количество срезов - 62, толщина среза - 2 мм, расстояние между срезами - 0.2 мм, FOV (поле обзора) - 220x220 мм², матрица - 110x110, время сканирования - 16 мин. 36 с, фактор ускорения - 2, hyperband (мультисрезовый фактор) - 3. Расчет коннектома был проведен с помощью программного обеспечения MULAN [3] для 9 метрик из трех семейств коннектометрических методов (корреляция, перенос энтропии и мгновенная когерентность).

Построены матрицы функциональной связности для двух групп (5 пациентов с диагнозом шизофрения, 5 здоровых добровольцев). Для каждого человека было построено 9 матриц функциональной связности, рассчитанных по каждой из метрик. Получено значимое различие для метрики двунаправленной корреляции между группами (t-критерий Стьюдента, $t = 21.8875$, $p < 0.005$).

Планируется масштабное исследование, направленное на построение моделей здорового мозга и мозга пациента с шизофренией.

1. Bookheimer, S. Y., Salat, D. H., Terpstra, M., et al. The Lifespan Human Connectome Project in Aging: An overview // *NeuroImage*. 2019. V. 185. P. 335–348.
2. Shahhosseini, Y., & Miranda, M. F. Functional Connectivity Methods and Their Applications in fMRI Data // *Entropy* (Basel, Switzerland). 2022. V. 24. No. 3. P. 390.
3. Wang, H. E., Friston, K. J., Bénar, C. G., et al. MULAN: Evaluation and ensemble statistical inference for functional connectivity. // *NeuroImage*. 2018. V. 166. P. 167–184.

А. Н. Коростелёва

E-mail: korosteleva_an@nrcki.ru

НИЦ «Курчатowski институт», Москва, Россия

Зрительная траектория — это характерный путь движений глаз и точек фиксации, возникающий, когда человек рассматривает изображение [1]. Особенности в этих траекториях движения глаз предложены как возможный маркер шизофрении [2,3], однако диагностика преимущественно симптоматична и нуждается в привлечении большего числа объективных показателей. Выявление надежного маркера, связанного с динамикой движения глаз, имеет высокий потенциал для увеличения точности диагностики. Большинство клинических исследований траекторий взгляда сосредоточено на изучении движений глаз при просмотре социальных сцен, особенно лиц [4]. Пациенты с шизофренией при просмотре лиц демонстрируют ограниченные траектории взгляда, что выражается в меньшем количестве фиксаций и сниженной концентрации на значимых чертах лица. Таким образом, анализ траекторий взгляда представляется ключевым инструментом в исследовании когнитивных и социальных дефицитов при шизофрении.

В рамках сотрудничества между НИЦ «Курчатowski институт» и Психиатрической клинической больницей № 1 им. Н.А. Алексеева с целью изучения возможности применения айтрекера (устройство для регистрации движений глаз и траекторий взгляда человека) в интересах психиатрии начаты экспериментальные исследования у пациентов с шизофренией. В эксперименте приняли участие 6 пациентов с шизофренией и 6 здоровых добровольцев - все мужчины в возрасте от 20 до 35 лет. Для регистрации движения глаз использовался айтрекер EyeLink 1000 Plus («SR Research», Канада). Во время эксперимента на экране монитора последовательно демонстрировались фотографии лиц шести мужчин в течении 7 сек. Один из них был хорошо знаком испытуемым (что каждый подтвердил после окончания эксперимента), а остальные лица были подобраны из базы KDEP [2]. Дополнительно исследовалось, влияет ли знакомство с лицом на фотографии на траекторию движения глаз по сравнению с незнакомыми лицами.

Первые исследования пациентов с шизофренией показали, что их траектории взгляда значительно отличаются от траекторий здоровых людей. Среднее количество фиксаций на глазах по всем участникам и изображениям у пациентов составило 17,21 ($\pm 4,89$), тогда как у здоровых людей оно было значительно выше - 32,17 ($\pm 2,21$). Пациенты с шизофренией также демонстрировали более длительные фиксации на одной точке лица, в среднем 460 мс (± 250 мс), по сравнению с 390 мс (± 180 мс) у контрольной группы. Кроме того, у них наблюдались более расширенные зрачки - средний размер составил 5928,91 ($\pm 1178,05$) у.е., тогда как у здоровых участников этот показатель был 3908,85 ($\pm 864,17$) у.е. В целом, пациенты с шизофренией демонстрируют ограниченное визуальное сканирование фотографий, что согласуется с данными зарубежных исследований. Примечательно, что их траектории взгляда при осмотре знакомых и незнакомых лиц не отличаются, что может указывать на устойчивые паттерны фиксации взгляда, независимые от степени знакомства с объектом.

1. Noton D., Stark L. Eye movements and visual perception //Scientific American. – 1971. – Т. 224. – №. 6. – С. 34-43.
2. Loughland C. M., Williams L. M., Gordon E. Schizophrenia and affective disorder show different visual scanning behavior for faces: a trait versus state-based distinction? //Biological psychiatry. – 2002. – Т. 52. – №. 4. – С. 338-348.
3. Streit M., Wölwer W., Gaebel W. Facial-affect recognition and visual scanning behaviour in the course of schizophrenia //Schizophrenia research. – 1997. – Т. 24. – №. 3. – С. 311-317.
4. Tatler B. W., Baddeley R. J., Gilchrist I. D. Visual correlates of fixation selection: Effects of scale and time //Vision research. – 2005. – Т. 45. – №. 5. – С. 643-659.

Ассоциация генетических вариантов генов *GBA* и *LRRK2* с риском развития мультисистемной атрофии в Северо-Западном регионе России

***А.О. Лавринова*¹, *А.С. Журавлев*^{1,2}, *Е.А. Демидова*¹, *В.Н. Пидюрчина*¹, *А.И. Безрукова*^{1,2}, *Т.С. Усенко*^{1,2}, *И.В. Милюхина*¹⁻³, *О.А. Беркович*², *С.Н. Пчелина*^{1,2}, *А.К. Емельянов*^{1,2}**

E-mail: lavrinova_ao@npri.nrcki.ru

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. акад. И.П. Павлова, Россия, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Институт мозга человека им. Н. П. Бехтеревой РАН, Россия, Санкт-Петербург, Россия*

Мультисистемная атрофия (МСА) – редкое, спорадическое, быстро прогрессирующее нейродегенеративное заболевание, которое имеет общие клинические и патологические признаки с болезнью Паркинсона (БП). В олигодендроцитах пациентов с МСА обнаруживаются многочисленные цитоплазматические включения, основным компонентом которых является альфа-синуклеин. МСА является самым агрессивным заболеванием среди всех синуклеинопатий (БП, БП с деменцией, деменция с тельцами Леви). Агрегаты данного белка обнаруживаются в мозге у пациентов с болезнью Гоше, обусловленной мутациями в гене *GBA*. К настоящему времени показано, что генетические варианты в генах *GBA* и *LRRK2* ассоциированы с развитием синуклеинопатий [1-3]. На данный момент для пациентов с МСА в Северо-Западном регионе России нет данных об ассоциации развития данного заболевания с мутациями в генах *GBA* и *LRRK2*.

В данном исследовании нами были проанализированы ассоциации генетических вариантов гена *GBA* (мутации N370S и L444P, полиморфные варианты E326K и T369M) и гена *LRRK2* (мутации G2019S и R1441C/G/H) с риском развития МСА среди жителей Северо-Западного региона России.

Исследование включало 107 пациентов с МСА и 434 индивидуума контрольной группы. Идентификация мутаций (N370S, L444P) и полиморфных вариантов (E326K, T369M) гена *GBA*, а также мутации R1441C/G/H гена *LRRK2* проводилась методом ПЦР-рестрикционного анализа; для мутации G2019S гена *LRRK2* использовался метод аллельной дискриминации.

По итогам проведенного скрининга в группе пациентов с МСА был выявлен 1 пациент с мутацией в гене *GBA* (L444P), 10 пациентов с полиморфными вариантами гена *GBA* (9 – E326K, 1 – T369M). В то же время в группе контроля был обнаружен один с мутацией в гене *GBA* (L444P), 16 – с полиморфными вариантами гена *GBA* (13 – E326K, 3 – T369M). Частота генетических вариантов гена *GBA* для пациентов с МСА составила для L444P – 0,93%, E326K – 8,41%, T369M – 0,93%. В контроле частоты L444P, E326K и T369M гена *GBA* составляли 0,25%, 3% и 0,95%, соответственно. Выявлено, что риск МСА был в 3 раза повышен у носителей аллеля риска G полиморфного варианта E326K гена *GBA* (OR=3,0 [95% CI: 1,24-7,16], p=0,015). В то же время ассоциации генетических вариантов L444P, N370S, T369M гена *GBA* и G2019S, R1441C/G/H гена *LRRK2* с риском развития МСА обнаружено не было.

Таким образом, полученные данные свидетельствуют об ассоциации полиморфного варианта E326K гена *GBA* с риском развития МСА среди жителей Северо-Западного региона России.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №24-25-00397.

1. Sidransky E. et al. Multicenter analysis of glucocerebrosidase mutations in Parkinson's disease// N Engl J Med. 2009. V. 361. No. 17. P. 1651-61.
2. Nalls M.A. et al. A multicenter study of glucocerebrosidase mutations in dementia with Lewy bodies// JAMA Neurol. 2013. V. 70. No. 6. P. 727-35.
3. Mata I.F., et al. LRRK2 in Parkinson's disease: protein domains and functional insights// Trends Neurosci. 2006. V. 29. No. 5. P. 286-293.

Получение стабильных клеточных линий для экспрессии вариантов *PLOD2*

Е.М. Латыпова, А.Е. Комиссаров, О.И. Большакова, С.В. Саранцева

E-mail: latypova_em@pnrp.nrcsk.ru

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Россия, Гатчина, Орлова роща

Синдром Брука (СБ) является редким врожденным синдромом и представляет собой состояние, при котором сочетаются врожденные контрактуры суставов и симптомы несовершенного остеогенеза. В качестве основных методов лечения наиболее широко используются ортопедические мероприятия, направленные на коррекцию положения сегментов конечностей и улучшение их функции, а также биофосфонаты, предназначенные для контроля процессов остеопороза. Несмотря на то, что впервые данный синдром был описан Альфредом Бруком еще в 1878 году, заболевание остается малоизученным [1].

Развитие Синдрома Брука (СБ) связывают с мутациями в гене *PLOD2* [2]. Ген *PLOD2* кодирует лизилгидроксилазу-2 (LH2, КФ 1.14.11.4), которая участвует в образовании стабилизированных поперечных связей коллагена и катализируют гидроксилирование лизина до гидроксипролина.

В результате альтернативного сплайсинга *PLOD2* образуется две формы белка: LH2a и LH2b [3]. Длинная форма LH2b экспрессируется повсеместно, в то время как более короткая форма LH2a, лишенная дополнительного экзона 13A, обнаружена в почках, селезенке, печени, хрящах и плаценте [4].

В ходе данной работы были получены генетические конструкции для экспрессии двух мутантных аллелей гена *PLOD2* слитых с геном зеленого флуоресцентного белка GFP. В качестве контроля была получена генетическая конструкция для экспрессии гена *PLOD2* дикого типа. Полученные генетические конструкции были трансфекцированы в клеточную линию HEK293 и DF2.

Получение стабильных клеточных линий с экспрессией мутантных аллелей гена *PLOD2* позволит изучить роль гена *PLOD2* в развитии СБ на модели *in vitro* и глубже понять механизмы патогенеза данного заболевания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-24-00555).

1. Буклаев Д.С., Костик М.М., Агранович О.Е., Трофимова С.И. Синдром Брука. Описание случая // Ортопедия, травматология и восстановительная хирургия детского возраста. - 2015. - Т. 3. - №3. - С. 44-47. doi: 10.17816/PTORS3344-47
2. Puig-Hervás, M.T., et al., Mutations in *PLOD2* cause autosomal-recessive connective tissue disorders within the Bruck syndrome--osteogenesis imperfecta phenotypic spectrum. *Hum Mutat*, 2012. 33(10): p. 1444-9.
3. Qi, Y. and R. Xu, Roles of *PLODs* in Collagen Synthesis and Cancer Progression. *Front Cell Dev Biol*, 2018. 6: p. 66.
4. Nyry, M., J. Lantto, and J. Myllyharju, Missense mutations that cause Bruck syndrome affect enzymatic activity, folding, and oligomerization of lysyl hydroxylase 2. *J Biol Chem*, 2009. 284(45): p. 30917-24.

Ю.В. Навесова¹, М.Н. Крахалев², Т.А. Зотина^{1,3}

E-mail: navesova7@gmail.com

¹Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

²Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

³Институт биофизики Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

Жидкие кристаллы (ЖК) — органические молекулы вытянутой формы, обладающие свойством самосборки, широко распространены в современном мире: ЖК-дисплеи, сенсоры, фильтры и пр. Для ЖК-систем известен эффект «хозяин–гость», при котором структура ЖК позволяет выявить анизотропию свойств растворенного вещества или расширить их функциональные возможности [1]. Одним из ярких примеров является обнаружение и использование линейного дихроизма (ЛД) молекул, заключающегося в различном поглощении света с взаимно перпендикулярными направлениями линейной поляризации. Эффект невозможно зарегистрировать в изотропных жидкостях, но при использовании ЖК ЛД легко детектируется, а также используется для переключения цветов в мониторах и умных окнах [2]. В данной работе представлены результаты исследования оптических характеристик смесей фотосинтетических пигментов с нематиком ЛН-396, а также их сравнение с ЛН-396, допированный коммерческими дихроичными красителями.

Фотосинтетические пигменты были экстрагированы из биомассы высших водных растений роголистника погружённого (*Ceratophyllum demersum* L.) и элодеи канадской (*Elodea canadensis* Michx.) и очищены с помощью сочетания хроматографических методик. В результате были получены ацетоновые экстракты общего комплекса фотосинтетических пигментов, хлорофилла *a*, хлорофилла *b*, β -каротина и лютеина. Экстракты смешивались с нематиком ЛН-396 и далее ацетон полностью испарялся при температуре 40 °С. Весовое соотношение пигментов в нематике составляло 0,25%. Структурные и оптические свойства полученных смесей нематиков изучались в ЖК ячейках с известным направлением ориентации ЖК (Mesostate LCD Industries Co., Ltd., Тайвань). Для сравнения характеристик ЛД ЖК, допированного фотосинтетическими пигментами, были изготовлены нематические ячейки с дихроичными красителями АВ4 и AR1 (NEMATEL, Германия) в идентичных концентрациях. Исследования проводились спектральными методами. Линейный дихроизм рассчитывался по формуле: $L_D = (T_{\perp} - T_{\parallel}) / (T_{\perp} + T_{\parallel})$, где T_{\perp} — значения пропускания поляризованного света, ориентированного перпендикулярно директору ЖК, T_{\parallel} — значения пропускания поляризованного света, ориентированного параллельно директору ЖК.

В работе были изучены 7 образцов экстрактов растительных пигментов и дихроичных красителей, находящихся в одинаковых условиях, что позволяет сравнивать величины ЛД и ширины пика поглощения на его полувысоте (ШПВ). Самыми высокими величинами ЛД и ШПВ пиков обладал представитель ксантофиллов - лютеин (0,9 и 111 нм, соответственно). Немного меньшие величины ЛД и ШПВ пиков были зарегистрированы для β -каротина (0,8 и 98 нм, соответственно). Величины ЛД коммерческих дихроичных красителей АВ4 (0,5) и AR1 (0,24) оказались в 1,8 - 3,8 раз меньше, чем у лютеина. Хлорофиллы *a* и *b* показали большие величины ЛД в синей области спектра, чем общий экстракт роголистника (0,29 и 0,31 против 0,26, соответственно), но имели меньшие величины ШПВ пиков поглощения.

1. Solladie G., Zimmermann R.G. Liquid Crystals: A Tool for Studies on Chirality // *Angewandte Chemie*. 1984. V. 23. P. 348–362.
2. Shen W. et al. Recent progress in functional dye-doped liquid crystal devices // *Advanced Functional Materials*. 2023. V. 33. No. 6. P. 2210664.

Влияние рентгеновского излучения в малых дозах на повреждение ДНК, клеточный рост и аутофагию в фибробластах человека

А.А. Осипов¹, А.К. Чигасова^{1,2}, Е.И. Яшкина^{1,3}, М.А. Игнатов^{1,3}, Н.Ю. Воробьева^{1,3}, А.Н. Осипов^{1,3,4}

E-mail: a-2-osipov@yandex.ru

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва, Россия

²Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

³ФГБУ ГНЦ РФ Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия

⁴КЕНДЛ Институт синхротронных исследований, Ереван, Армения

Эффекты ионизирующего излучения в малых дозах (10-100 мГр) являются предметом серьезных дискуссий среди радиобиологов. Многие исследования показывают не только несостоятельность линейной беспороговой модели, основанной на линейной экстраполяции эффектов больших доз радиации из эффектов малых доз, но и существование ряда малоизученных аспектов, требующих серьезных фундаментальных исследований [1-3].

Целью данной работы было сравнение ранних (0.5, 4, 24, 48 и 72 ч) и поздних (5, 10 и 15 клеточные пассажи) пострадиационных изменений фокусов белков репарации ДНК (γ H2AX, 53BP1, pATM и p-p53 (Ser-15)), пролиферации, аутофагии и старения в фибробластах человека, подвергшихся воздействию рентгеновского излучения в дозах 100 и 2000 мГр.

Через 30 минут после облучения в дозе 100 мГр количественный выход фокусов γ H2AX, 53BP1 и pATM на единицу дозы и относительная интегральная флуоресценция фокусов γ H2AX, 53BP1 и pATM на единицу дозы были более чем в два раза выше, чем после облучения в дозе 2000 мГр. Снижение количественного выхода фокусов после воздействия дозы 2000 мГр может свидетельствовать о слиянии отдельных фокусов в более крупные «центры репарации» или об увеличении скорости репарации ДНК в ущерб её корректности. Увеличение количества фокусов γ H2AX и p-p53 (Ser-15), а также повышенное количество SA- β -gal-позитивных и аутофагических клеток было отмечено на 15-м пассаже после облучения в дозе 2000 мГр. В отличие от облучения в дозе 2000 мГр, воздействие рентгеновского излучения в низких дозах не вызывает увеличения количества фокусов белков репарации ДНК и не приводит к снижению пролиферативной активности и преждевременному старению, по крайней мере, до 15-го пассажа после облучения.

В заключение следует отметить, что данное исследование способствует пониманию механизмов формирования ранних и отдаленных молекулярных и клеточных эффектов в фибробластах человека, подвергшихся воздействию рентгеновского излучения во время диагностических процедур и лучевой терапии. Эти знания необходимы для идентификации молекулярных мишеней, разработки стратегий защиты от радиации и уточнения допустимых пределов доз.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ №23-14-00078.

1. Abalo, K.D.; Rage, E.; Leuraud, K.; Richardson, D.B.; Le Pointe, H.D.; Laurier, D.; Bernier, M.O. Early life ionizing radiation exposure and cancer risks: Systematic review and meta-analysis. *Pediatr. Radiol.* 2021, 51, 45–56.
2. Nawa, T. Low-dose CT screening for lung cancer reduced lung cancer mortality in Hitachi City. *Int. J. Radiat. Biol.* 2019, 95, 1441–1446.3.
3. Jonas, D.E.; Reuland, D.S.; Reddy, S.M.; Nagle, M.; Clark, S.D.; Weber, R.P.; Enyioha, C.; Malo, T.L.; Brenner, A.T.; Armstrong, C.; et al. Screening for Lung Cancer with Low-Dose Computed Tomography: Updated Evidence Report and Systematic Review for the US Preventive Services Task Force. *JAMA* 2021, 325, 971–987.

Алгоритм автоматического определения компактно-связанных кластеров аминокислотных остатков центров связывания белков-рецепторов***С.А. Панасенко^{1,2}, М.Г. Петухов¹***

E-mail: panasenko.sa@edu.spbstu.ru

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*²*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

Центр связывания – это функционально значимая область в структуре белка, где происходит связывание лигандов. Структура белков может содержать один или несколько центров связывания металлов и органических соединений, которые обычно имеют меньшие размеры по сравнению с размерами лекарство-подобных соединений. Определение центра связывания лекарство-подобных соединений имеет большое значение для исследования механизмов их фармакологической активности. Наличие меньших по размеру, нецелевых сайтов связывания лекарство-подобных соединений в молекуле белка может сильно увеличивать размер области поиска низкоэнергетических конформаций лигандов при их связывании с целевыми белками и, таким образом, затруднить работу вычислительных методов молекулярного докинга и виртуального скрининга лигандов (VLS) [1]. В связи с этим возникает задача ограничения зоны поиска основным центром связывания лекарство-подобных соединений (компактизация), что обеспечит меньший объем поиска, более высокую точность и вычислительную эффективность используемых методов VLS. Для достижения поставленной цели нами был разработан алгоритм автоматического определения компактно-связанных кластеров аминокислотных остатков центров связывания лекарство-подобных лигандов в белках-рецепторах.

Новый метод идентификации пространственных элементов белков основан на пространственной кластеризации $C\alpha$ атомов аминокислотных остатков, входящих в аннотированные в базе данных UniProt [2] сайты связывания ферментов человека из базы данных PDB. Алгоритм гарантирует, что определяется компактный центр связывания лигандов, размеры которого соответствуют типичному размеру лекарство-подобного соединений, что позволяет избежать избыточного деления области на кластеры. В методе используется алгоритм пространственной кластеризации с помощью пересчёта положения текущего центра масс основного кластера при каждом добавлении в кластер новых элементов. Алгоритм был реализован на языке программирования Фортран 90 для работы в среде ICM-Pro, – пакета программ для молекулярного моделирования и конструирования лекарств.

Новый метод был протестирован на модельном примере двух пространственных кластеров, состоящих из 25 и 3 $C\alpha$ атомов, размеры этих кластеров составляют порядка 20Å и 7Å, соответственно. При сближении центров масс наблюдается ступенчатое ухудшение эффективности разделения точек на кластеры. Максимальная эффективность 100% была достигнута на расстоянии порядка 18Å соизмеримым с типичными размерами лекарство-подобных органических соединений и ультракоротких пептидов. Метод демонстрирует высокую эффективность разделения пространственных кластеров ~90% на расстояниях, соответствующих началу процесса их слияния. В дальнейшем метод будет внедрен в программу для подготовки структуры ферментов к докингу с лекарство-подобными соединениями, это позволит сосредоточить вычисления на областях, наиболее вероятных для связывания лиганда, что улучшит точность и вычислительную эффективность стандартных методов VLS, встроенных в ICM-Pro.

1. Neves M.A., Totrov M., Abagyan R. Docking and scoring with ICM: the benchmarking results and strategies for improvement //Journal of computer-aided molecular design. – 2012. – Т. 26. – №. 6. – С. 675-686.
2. UniProt Consortium. UniProt: the Universal Protein Knowledgebase in 2023 //Nucleic Acids Research. – 2023. – Т. 51. – №. 1. – С. 523-531.

Влияние вариантов гена SNCA (rs3756063, rs356219, rs11931074, rs356168) на уровень мРНК его сплайсинг-изоформ при мультисистемной атрофии

***В.Н. Пидюрчина¹, А.О. Лавринова¹, А.С. Журавлев¹, Е.А. Демидова¹, И.В. Милюхина^{1,2,3},
О.А. Беркович², С.Н. Пчелина^{1,2}, А.К. Емельянов^{1,2}***

E-mail: pidyurchina.vn@gmail.com

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. акад. И. П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

³Институт мозга человека им. Н. П. Бехтеревой РАН, Санкт-Петербург, Россия

Мультисистемная атрофия (МСА) – нейродегенеративное заболевание, которое характеризуется патологическим накоплением агрегатов альфа-синуклеина в цитоплазме олигодендроцитов. Изоформы альфа-синуклеина (SNCA140, SNCA126, SNCA112, SNCA98) обладают различной способностью к агрегации [1]. Предполагается, что однонуклеотидные варианты (ОНВ) гена SNCA могут влиять на уровень экспрессии данного гена [2, 3].

Целью исследования являлась оценка влияния ОНВ rs3756063(C/G), rs356219(A/G), rs11931074 (G/T), rs356168(A/G) локуса гена SNCA на уровень мРНК его сплайсинг-изоформ (SNCA140, SNCA126, SNCA112) в лимфоцитах периферической крови (ЛПК) пациентов с мультисистемной атрофией и индивидуумов контрольной группы.

Исследование включало 96 пациентов с МСА (возраст 61,2±6,4 года, 40 мужчин, 56 женщин) и 485 индивидуумов контрольной группы (возраст 62,3±8,3, 246 мужчин, 239 женщин). Скрининг ОНВ проводился методом ПЦР с последующим рестрикционным анализом. Оценка уровня мРНК сплайсинг-изоформ гена SNCA осуществлялась в ЛПК 24 пациентов с МСА (возраст 63,6±7,3 лет, возраст начала 59,9±7,3 лет, 10 мужчин) и 32 индивидуумов контрольной группы без неврологических заболеваний (возраст 64,9±6,7 лет, 16 мужчин). Уровень мРНК сплайсинг-изоформ гена SNCA в ЛПК оценивался методом количественной ПЦР в режиме реального времени.

Обнаружена ассоциация аллеля rs11931074*Т с риском развития МСА (OR=2,02 [95% CI: 1,2-3,5], p=0,012). Выявлено понижение уровня мРНК SNCA140 в ЛПК у пациентов с МСА (2,32(0,48-10,46)) при сравнении с индивидуумами контрольной группы (5,12 (0,33-37,48)) (p=0,041). Обнаружено, что соотношения уровней мРНК сплайсинг-изоформ SNCA112/SNCA140 и SNCA112/SNCA126 в ЛПК у пациентов с МСА (0,74(0,002-1,847) и 0,83(0,002-12,038), соответственно) повышены по сравнению с лицами контрольной группы (0,05 (0,001-0,430) и 0,04 (0,001-0,344)) (p=0,01 и p<0,001, соответственно).

Таким образом, носительство аллеля rs11931074*Т локуса гена SNCA повышает риск развития МСА среди жителей Северо-Западного региона России в 2 раза. МСА характеризуется повышением соотношения уровней мРНК сплайсинг-изоформ SNCA112/SNCA140 и SNCA112/SNCA126 и снижением уровня мРНК SNCA140 в ЛПК.

Работа выполнена при поддержке «КГЦ – ПИЯФ» программой развития центров генетических исследований мирового уровня, Соглашение No. 075-15-2019-1663. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500037-7-1.6.8;1.6.1;1.6.2;1.6.3 Изучение молекулярных и клеточных компонентов патогенеза социально-значимых заболеваний для разработки методов ранней диагностики и лечения).

1. Murray I.V. et al. Role of alpha-synuclein carboxy-terminus on fibril formation in vitro // Biochemistry. 2003. V. 42. No. 28. P. 8530–8540.
2. McCarthy JJ. et al. The effect of SNCA 3' region on the levels of SNCA-112 splicing variant. // Neurogenetics. 2011. V. 12. No. 1. P. 59–64.
3. Schmitt I. et al. L-dopa increases α -synuclein DNA methylation in Parkinson's disease patients in vivo and in vitro. // Mov Disord. 2015. V. 30. No. 13. P. 1794–1801.

Противоопухолевая активность гибридного пептида на основе цекропина А и кателицидина 4 водяного буйвола

А.Е. Рудель, Т.А. Филатенкова, М.С. Жаркова

E-mail: alenarudel@gmail.com

ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург, Россия

Пептиды системы врожденного иммунитета рассматриваются как возможная основа для создания препаратов с нетипичным для существующих противоопухолевых средств механизмом, перспективных в борьбе с рецидивирующими и обладающими лекарственной устойчивостью опухолями. Ранее, при исследовании гибридных пептидов на основе триптофан- (W), лейцин- (L) и пролин- (P) богатых последовательностей, пептид CaBuCr, созданный на основе N-концевого (1-8) фрагмента цекропина А и кателицидина 4 азиатского буйвола BuCATHL4D, показал наилучшую эффективность в отношении 6 линий опухолевых клеток и селективность действия в сравнении с активностью против нетрансформированных клеток: фибробластов кожи (ФБ) и мононуклеаров периферической крови (МНПК) человека. Одной из стратегий, позволивших добиться роста селективности действия и снижения гемолитической активности CaBuCr в сравнении с BuCATHL4D, была частичная замена остатков аргинина (R) остатками лизина (K) в центральном, регуляризованном участке последовательности. По данным литературы, полная замена R на K снижала гемолитическую активность других богатых W и P пептидов тритрптицина и индолицидина [1].

Целью данной работы являлось изучение возможностей дальнейшей оптимизации свойств CaBuCr: усиления противоопухолевой активности, повышения селективности, уменьшения длины пептида с сохранением или улучшением достигнутых параметров.

Методом твердофазного химического синтеза были получены модифицированные версии CaBuCr K1–4: K1 — с полной заменой всех оставшихся R на K; K2 — с дополнительным удалением C-концевого глицина; K3 — с дополнительной к K2 заменой C-концевого фенилаланина на триптофан и его перестановкой с предшествующим лизином для полной регуляризации C-концевого участка; K4 — с последующим укорочением последовательности на один PW фрагмент. Противоопухолевое и цитотоксическое действие модифицированных пептидов было проанализировано в сравнении с CaBuCr в отношении опухолевых и нормальных клеток (K562, A549, Caco2, HepG2, ФБ и МНПК человека, С6 крысы, асцитной карциномы Эрлиха мыши), при помощи МТТ-теста [2]. Гемолитическую активность оценивали колориметрически (OD₅₄₀) по количеству выброшенного из клеток гемоглобина после 30 мин инкубации 2,5% суспензии эритроцитов человека с исследуемыми пептидами. Обнаружено, что полная замена R на K не приводит к значимому изменению активности и селективности противоопухолевого действия, однако в 1,5 раза снижает гемолитический эффект в исследованном диапазоне концентраций. Последующее удаление остатка глицина приводит к возвращению гемолитической активности на прежний уровень, а дальнейшая регуляризация C-конца пептида дополнительно снижает индекс селективности противоопухолевого действия на 40%, что может указывать на важность структуры C-концевого участка в обеспечении селективности действия CaBuCr. Укороченный пептид K4 демонстрирует индекс селективности сходный с исходным CaBuCr и сниженную в 2,8 раза гемолитическую активность, однако средняя геометрическая 50% эффективная концентрация (G ИК₅₀) в отношении опухолевых клеток также возрастает почти в 2 раза. Таким образом, целесообразной представляется только модификация K1.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России: НИОКТР №122112100051-0.

1. Arias M. et al. Selective anticancer activity of synthetic peptides derived from the host defence peptide tritripticin // *Biochim. Biophys. Acta. Biomembr.* 2020. V. 1862, No. 8. P. 183228.
2. Mosmann T. Rapid colorimetric assay for cellular growth and survival: application to proliferation and cytotoxicity assays // *Journal of immunological methods.* 1983. V. 65. No. 1–2. P. 55–63.

**Анализ септированных контактов при дисфункции гена *swiss cheese*
*Drosophila melanogaster***

Е.В. Рябова, Е.А. Иванова, А.В. Золотникова, С.В. Саранцева

E-mail: ryabova_ev@pnpi.nrcki.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

У многоклеточных организмов эпителий является первичной структурной тканью, обеспечивающей ограждение и контроль внутренней среды различных органов и клеток. Его способность изолировать соседние клетки и создавать парацеллюлярный барьер обеспечивается межклеточными контактами. У плодовой мушки *Drosophila melanogaster* эту функцию выполняют септированные контакты, образуя такие важные барьеры, как гематоэнцефалический барьер в мозге, гематотестикулярный барьер между клетками цист в семенниках, кишечный барьер. В настоящее время хорошо изучен молекулярный состав септированных контактов, а именно, выявлено более 30 различных белков, входящих в их состав и обеспечивающих их функцию, например DLG-1 регулирует размер клеток, Neurexin обеспечивает целостность септированных контактов [1]. Слаженная работа всех составляющих компонентов септированных контактов обеспечивает нормальную физиологию всего организма в целом.

Экспрессия гена *swiss cheese/PNPLA6*, продукт которого выполняет функцию сериновой эстеразы, наблюдается в репродуктивной системе самцов, в среднем отделе кишечника, мальпигиевых сосудах, субперинеуральной глии и жировом теле взрослых особей [2]. В данной работе будут представлены результаты экспериментов по анализу морфологии септированных контактов при дисфункции гена *sws/PNPLA6* в различных клетках организма.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-74-00165, <https://rscf.ru/project/24-74-00165/>.

1. Rouka E. et al. The *Drosophila* septate junctions beyond barrier function: Review of the literature, prediction of human orthologs of the SJ-related proteins and identification of protein domain families // *Acta Physiologica*. 2021 V. 231. e13527.
2. Melentev P.A. et al. *Drosophila* Lysophospholipase Gene *swiss cheese* Is Required for Survival and Reproduction // *Insects*. 2022. V. 13. №. 1. P. 14–35.

Синтез и биологические свойства 1-аминоацилосигерматранов

Г.К. Савельев^{1,2,3}, Д.В. Лёзов¹, Т.А. Кочина¹, М.Н. Романенко^{2,3}, К.С. Антонец^{2,3}, А.А. Нижников^{2,3}
 E-mail: gr2001sav@gmail.com

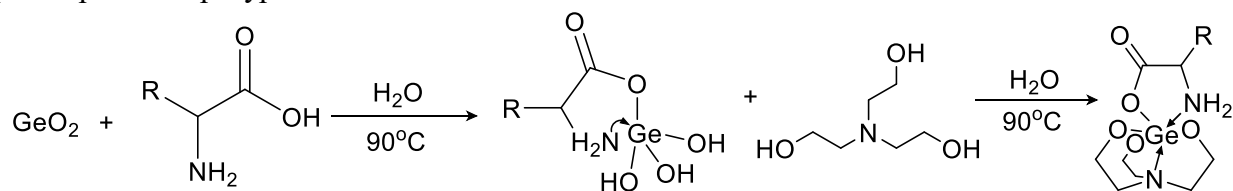
¹ НИЦ «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов, Санкт-Петербург, Россия

² Лаборатория протеомики надорганизменных систем, Всероссийский научно-исследовательский институт сельскохозяйственной микробиологии, Санкт-Петербург, Россия

³ Биологический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Поиск уникальных свойств германийорганических веществ, который начался в 60-е года прошлого века привёл к открытию нового класса биологически активных соединений – герматранов. Эти соединения характеризуются наличием дополнительной донорно-акцепторной связи между атомом N и Ge, что расширяет координационную сферу атома германия. Данный аспект способствует проявлению специфической биологической активности [1], которая также опосредована природой заместителя при атоме германия. Всё это обуславливает необходимость поиска наиболее эффективных заместителей, придающих герматранам уникальные свойства, одними из которых, в связи с вовлеченностью в различные биологические процессы, потенциально могут быть аминокислоты.

Данные патентов свидетельствуют о высокой биологической активности аддуктов GeO₂ с аминокислотами [2]. Исследование биологического воздействия герматрана на микроорганизмы уже ранее проводили, но в литературе практически отсутствует информация о различных физиологических эффектах их комплексов с аминокислотами [3]. В связи с этим целью данного исследования является синтез, изучение структуры современными физико-химическими методами, а также биологических свойств ранее неизученных 1-аминоацилосигерматранов, которые получены путем взаимодействия D,L-метионата, β-аланината, L-валината германия с триэтаноломином. Комплексы были получены в водной среде при температуре 80-90°C по схеме:



Целевые продукты были выделены в виде порошков.

В ходе исследования биологической активности было зафиксировано что исследуемые 1-аминоацилосигерматраны обладали значимым бактерицидным эффектом в отношении как минимум одного из тестируемых видов бактерий (*Pseudomonas syringae* 00904, *Pseudomonas syringae* 03278, *Xanthomonas campestris* pv. *campestris* 23, *Pseudomonas* sp. 8949, *Pectobacterium atrosepticum* 5128).

Работа выполнена в рамках государственного задания (№ гос. рег. 1023032900385-8-1.4.3) НИЦ «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова и при поддержке СПбГУ, шифр проекта ID Pure 124032000041-1.

1. Menchikov L. G., Popov A. V. Physiological activity of trace element germanium including anticancer properties //Biomedicines. – 2023. – Т. 11. – №. 6. – С. 1535.
2. Pat. 2476436 Russian Federation, IPC C07F 7/30 A61K 31/28. Complex compounds of germanium with amino acids and carboxylic acids/ A.D. Isaev, T.O. Manashevov, I.V. Ambrosov, S.K. Matelo; applicant and patent holder Limited Liability Company "VDS PHARMA". - No.: 2012102525/04; application 25.01.2012, publ. 27.02.2013.
3. Garabadzhiu A. V. et al. The influence of silatranes, germatranes, protatranes, and triethanolamine on vital functions of microorganisms //Doklady Biological Sciences. – Springer Nature BV, 2011. – Т. 439. – №. 1. – С. 264.

Низкоконцентрационное воздействие солей U (235+238) и лантаноидов (Ce, Sm, Gd) на люминесцентный ферментативный биотест***А.А. Семенова¹, О.В. Колесник^{2,3}, А.С. Сачкова¹, Н.С. Кудряшева^{2,3}***

E-mail: a.smnv296@gmail.com

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия²Институт биофизики СО РАН, Красноярск, Россия³Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

Необходимость изучения влияния соединений урана на организмы в природных водах обусловлена их сильной токсичностью и радиоактивностью [1]. При попадании внутрь организма, уран может вызывать прямые и косвенные биоэффекты [2]. Биолюминесцентный анализ в настоящее время является одним из перспективных экспрессных методов биологического мониторинга окружающей среды. Преимущества этого биотеста – высокая чувствительность и скорость анализа, простота и доступность устройств для регистрации [3]. В работе использовали люминесцентную систему двух сопряженных реакций, катализируемых ферментами NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой, выделенных их морских люминесцентных бактерий. Данная система является компонентом живой клетки; по изменению её параметров можно судить о состоянии клеточного организма в целом.

Целью данной работы является изучение низкоинтенсивного воздействия урана (235+238) на люминесценцию ферментативной системы морских бактерий в интервале его концентраций (10^{-3} – 10^{-11} М), выявление роли активных форм кислорода (АФК) в протекающих процессах, а также сравнение эффектов нитрата уранила и ряда солей тяжелых металлов из группы лантаноидов (**Ce, Sm, Gd**).

Получены зависимости интенсивности биолюминесценции биферментной системы от концентрации нитрата уранила и хлоридов лантаноидов. Не обнаружено активации биолюминесценции ураном, которую наблюдали ранее под действием других альфа-излучающих радионуклидов [3], наблюдали только ингибирование биолюминесценции. Этот результат может быть связан с низкой удельной радиоактивностью урана. Сопоставление концентраций солей уранила и лантаноидов (**Ce, Sm, Gd**), подавляющих биолюминесценцию на 50% ($IC_{50} = 4 \cdot 10^{-6}$, $2 \cdot 10^{-4}$, $2 \cdot 10^{-5}$, $5 \cdot 10^{-5}$ М соответственно), показало, что соль уранила характеризуется наибольшей ингибирующей способностью. Этот факт указывает на то, что, несмотря на низкую удельную радиоактивность урана, его ингибирующая способность включает не только химическую, но и радиационную составляющую. Этот вывод подтверждает и увеличение содержания АФК в широком интервале концентраций уранила (10^{-3} – 10^{-11} М), в то время как лантаноиды при тех же концентрациях уменьшали или не влияли на содержание АФК в системе.

Исследовали детоксицирующую роль гуминовых веществ в растворах солей уранила и лантаноидов. Было показано, что ГВ снижают ингибирующее действие всех солей металлов на биолюминесценцию системы. Полученные результаты демонстрируют важную роль ГВ в природных процессах в регионах с низким уровнем радиоактивного загрязнения и загрязнения тяжелыми металлами: ГВ может смягчать реакции микроорганизмов на низкодозовое радиоактивное облучение в растворах солей уранила и химическую токсичность тяжелых атомов.

1. Titova A. D. et al. Определение урана в водных растворах методом времяпролетной масс-спектрометрии с импульсным тлеющим разрядом после его концентрирования окисленными углеродными нанотрубками // Аналитика и контроль. – 2020. – Т. 24. – №. 2. – С. 96-106.
2. Орумо, К. Особенности воздействия ионизирующего излучения на биологические объекты и методы его радиационного контроля на ядерных объектах / К. Орумо, А. П. Елохин, А. И. Ксенофонов // Глобальная ядерная безопасность. - 2020. - № 2. – С. 16-41
3. Колесник О.В., Рожко Т.В., Лапина М.А., Соловьёв В.С., Сачкова А.С., Кудряшева Н.С. // MDPI. Bioengineering. 2021. Т. 8. № 194. С. 1–13.

Недеструктивное одновременное определение размера, массы и заряда спор *Lycopodium Clavatum* в ловушке Пауля

Е.Э. Слепнёва^{1,2}, М.С. Семьнин¹, Д.П. Щербинин¹, В.В. Рыбин¹,
А.В. Иванов¹, С.С. Рудый¹

E-mail: slepnyova-liza@yandex.ru

¹Университет ИТМО, МНОЦ Физики наноструктур, Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Несомненно, что все физические параметры таких биологических объектов как клетки, бактерии и споры, напрямую связаны с их биохимическими параметрами, а также с процессами, составляющими их биоэнергетику. Так известно, что изменение размера, массы, формы и поверхностного заряда данных биологических объектов может свидетельствовать об их патологическом развитии, физических повреждениях и возникновении мутаций [1]. Очевидно, что исследование физических параметров клетки важно и с точки зрения описания особенностей (выявления закономерностей) изменений, происходящих на определенных этапах жизненного цикла клеток. Форму и размер клеток можно изучать с помощью различных микроскопических методов, а поверхностный заряд можно измерять с помощью методов DLS. С другой стороны, измерение массы отдельных биологических микрообъектов по-прежнему остается нетривиальной технической задачей.

Сегодня активно разрабатываются методы контролируемого захвата, удержания и отбора различных микрообъектов с использованием методов электродинамического захвата. Здесь мы впервые предлагаем использовать подходы электродинамического захвата для одновременного и неразрушающего определения размера, массы и заряда биологических микрообъектов. И наиболее перспективным инструментом для реализации таких подходов является линейная квадрупольная ловушка Пауля. В данной работе представлены результаты пилотного исследования, посвященного измерению массы, заряда и размера спор *Lycopodium clavatum* с использованием метода NDI, основанного на анализе траектории объекта, пойманного в ловушку Пауля при нормальном атмосферном давлении [2].

Размеры спор *Lycopodium clavatum*, определенные методом NDI, находятся в диапазоне 12–22 мкм, что близко к данным, полученным микроскопическими методами. Значения поверхностного заряда, определенные в экспериментальном исследовании, составляют диапазон от 60 до 120 фКл, что также соответствует характерным значениям заряда микрочастиц, локализованных в ловушках Пауля [3]. Массы отдельных спор составляют от 5 до 25 нг. И несмотря на некоторые косвенные оценки (соответствующие наблюдаемым результатам), в литературе отсутствуют данные о массе отдельных спор *Lycopodium clavatum*, поскольку, как уже упоминалось, прямое измерение массы биологических микрообъектов на сегодняшний день не является легко выполнимой задачей.

Особенностями метода NDI также являются быстрота измерения, одновременное определение нескольких основных физических параметров и возможность работы с единичными объектами. Важно и то, что предлагаемый подход является неразрушающим и может быть дополнен стандартными методами оптического спектрального анализа.

Исследование выполнено при поддержке Российского Научного Фонда и правительства г. Санкт-Петербург в рамках проекта 24-22-20042.

1. Prudinnik D.S. et al. Deformability of Heterogeneous Red Blood Cells in Aging and Related Pathologies// Aging and Disease, 2024, V. 16. No. P. 1-12
2. Rybin V, et al. Novel nonlinear damping identification method: Simultaneous size, mass, charge and density measurements of a microparticle in quadrupole trap// Powder Technology, 2023, V. 427, No. 118717
3. Libbrecht K.G. et al. Improved microparticle electrodynamic ion traps for physics teaching// American journal of physics, 2018 V. 86, No. P. 539-558

Церулоплазмин и фибриноген влияют на скорость амебоидного движения нейтрофилов периферической крови

Н.Д. Федорова¹, С.В. Горелов^{1,2}, А.В. Швецов^{1,2,3}, Е.Ю. Варфоломеева¹

E-mail: fedorova_nd@pnpi.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ), Санкт-Петербург, Россия

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Нейтрофилы - наиболее многочисленные клетки системы врожденного иммунитета человека, мигрирующие из русла крови в ткани к очагу воспаления [1]. Они крайне чувствительны к микроокружению, в том числе и к составу плазмы крови. Было сделано предположение, что некоторые белки острой фазы воспаления (БОФ), постоянно присутствующие в плазме крови и значительно меняющие концентрацию в течение патологических и некоторых физиологических процессов, могут быть вовлечены в модификацию функциональной активности нейтрофилов. В наших более ранних работах показано влияние таких БОФ, как церулоплазмин и фибриноген на способность нейтрофилов периферической крови к генерации активных форм кислорода [2,3,4].

Целью данной работы являлось исследование влияния церулоплазмينا и фибриногена на подвижность нейтрофилов периферической крови. Пробоподготовка осуществлялась в соответствии с ранее опубликованной нами методикой [5]. Оценка подвижности нейтрофилов производилась с использованием конфокального микроскопа Leica SP5 (Leica, Германия). Усовершенствованный алгоритм отслеживания клеток был разработан с использованием языка программирования Python для анализа данных.

Таким образом, после проведения статистической обработки данных был сделан вывод, что фибриноген и церулоплазмин оказывают статистически значимое влияние на скорость амебоидного движения нейтрофилов периферической крови. Было обнаружено, что фибриноген значительно увеличивает подвижность нейтрофилов, при этом средняя скорость повышалась примерно на 45% - 61,35% относительно контрольного образца. Напротив, церулоплазмин приводил к уменьшению подвижности, при этом средняя скорость снижалась примерно на 21,7% - 31,76%.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500037-7-1.6.8;1.6.1;1.6.2;1.6.3 Изучение молекулярных и клеточных компонентов патогенеза социально-значимых заболеваний для разработки методов ранней диагностики и лечения).

1. Rosales C. Neutrophils at the crossroads of innate and adaptive immunity. *J Leukoc Biol.* 2020 Jul;108(1):377-396.
2. Varfolomeeva EY et al. Ceruloplasmin decreases respiratory burst reaction during pregnancy. 2016. *Free Radic Res.* Vol. 50(8), pp. 909-19.
3. Федорова Н.Д. и др. Вирусные инфекции влияют на функциональную активность нейтрофилов периферической крови. *Актуальные вопросы биологической физики и химии.* 2021. 6(1). с. 115-123.
4. Федорова Н.Д. и др. Влияние белков острой фазы воспаления на активность нейтрофилов периферической крови. *Биофизика.* – 2023. – Т. 68, № 3. – С. 522-528.
5. Fedorova N., Sokolov, A., Trashkov, A., and Varfolomeeva, E. 2023. The preparation of samples for studying neutrophils without their isolation. *Bio. Comm.* 68(3): 145–150.

Chronic MCT supplementation does not affect cognitive abilities and neuroplasticity-related gene expression in adult female Wistar rats in a model of LPS-induced neonatal inflammation

E.A. Shirokov¹, E.A. Kim^{1,2,3}, V.A. Nikitina¹, A.P. Schwarz⁴, O.E. Zubareva⁴, I.N. Abdurasulova¹, V.M. Klimenko¹, A.N. Trofimov^{1,5}

E-mail: egor.a.shirokov@gmail.com

¹*Institute of Experimental Medicine, St. Petersburg, Russia*

²*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia*

³*St. Petersburg Chemical and Pharmaceutical University, St. Petersburg, Russia*

⁴*Sechenov Institute of Evolutionary Physiology and Biochemistry of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia*

⁵*Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan*

Neonatal inflammation has the potential to disrupt CNS development and predispose affected individuals to various forms of cognitive dysfunction, such as mild cognitive impairment, later in life. Possible mechanisms, conveying detrimental effects of inflammation on cognition, include long-term alterations in expression of genes involved in processes of neuroplasticity, and genes encoding for components of the brain glutamatergic system. While LPS administration to rat pups is one of the most widely used models of neonatal inflammation [1], the specifics of inflammation induction protocols, including the sex of the animals, differ between laboratories. For example, in our group, male Wistar rats are usually used, and data on the applicability of this model to female animals are lacking. Concurrently, ketogenic interventions in general, and medium-chain triglyceride (MCT) supplementation in particular, are shown to possess procognitive effects both in clinical settings [2, 3], and male Wistar rat models [4], but once again data on female rats are lacking.

This study investigated the effects of chronic dietary MCT supplementation on cognitive impairments in adult female Wistar rats in a model of neonatal inflammation. Neonatal inflammation was induced by administering LPS (25 µg/kg) during the third week of postnatal development. LPS-control animals were administered saline instead. Adult animals then received 3 g/kg of MCT oil (C8 + C10 fatty acids) for 28 days via orogastric gavage. MCT-control animals received equivolumetric amounts of lard. Working memory was assessed in the Y-maze test; locomotor activity, anxiety-like and exploratory behaviors were assessed in the Open Field test; spatial memory was assessed in the Morris Water Maze test. Serum levels of β-hydroxybutyrate (βHB) were measured, as well as relative expression levels of neuroplasticity genes (*Plat*, *Bdnf*, *Fgf2*, *Mmp9*, *Timp1* and *Mmp9/Timp1* ratio), and genes encoding components of the brain glutamatergic system (*Grin1*, *Grin2a*, *Grin2b*, *Gria1*, *Gria2*, *Slc1a2*) were analyzed in the dorsal hippocampus.

Ultimately, the results indicated that neither early postnatal LPS administration, nor MCT supplementation, nor their interaction produced significant effects on cognitive abilities or the expression profiles of the examined genes in female Wistar rats. Levels of βHB were increased 30 and 60 minutes after MCT supplementation, but returned to baseline thereafter. Together, these findings indicate the possibility of sex-specific differences in effects of LPS-induced inflammation and MCT supplementation.

1. Batista C.R.A. et al. Lipopolysaccharide-Induced Neuroinflammation as a Bridge to Understand Neurodegeneration // *Int. J. Mol. Sci.* 2019. Vol. 20, № 9. P. 2293.
2. Kovács Z. et al. Therapeutic potential of exogenous ketone supplement induced ketosis in the treatment of psychiatric disorders: Review of current literature // *Front. Psychiatry.* 2019. Vol. 10, № MAY. P. 1–15.
3. Shcherbakova K. et al. Supplementation of Regular Diet With Medium-Chain Triglycerides for Procognitive Effects: A Narrative Review // *Front. Nutr.* 2022. Vol. 9, № July.
4. Shcherbakova K. et al. Short- and long-term cognitive and metabolic effects of medium-chain triglyceride supplementation in rats. // *Heliyon.* Elsevier Ltd, 2023. Vol. 9, № 2. P. e13446.

Исследование фрактальной структуры еловых веток с помощью Фурье-анализа их изображений

О.Д. Шнырков^{1,2}, Е.Г. Яшина^{1,2}, К.А. Пиеничный¹, С.В. Григорьев^{1,2}

E-mail: oleg.shnyrkov@mail.ru

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

²*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что измерение их привычными нам мерами (длина, площадь, объём) даёт разные результаты в зависимости от выбора мерного отрезка (масштаба). Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. При помощи моделирования экспериментов по малоугловому рассеянию света с использованием численного преобразования Фурье, нашей командой была разработана классификация фрактальных и нефрактальных объектов в двумерном пространстве [2]. Логарифмические фракталы – класс фракталов, представители которого имеют иерархическую ветвящуюся структуру и подчиняются закону равенства площади на разных уровнях их иерархии (разных масштабах). В нашей работе [3] было показано, что боковая проекция взрослого листовенного дерева является логарифмическим фракталом.

Мы использовали метод численного Фурье-анализа для экспериментального изучения фрактальной структуры ветвей ели. Изучены изображения еловых лап взрослого дерева размером более 10 метров на различной высоте дерева. Фурье образы фотографий еловых лап, демонстрируют одинаковую структуру кривой малоуглового рассеяния: область Гинье, два участка с прямолинейным характером спада интенсивность, область Гаусса. Мы предложили математическую модель, описывающую полученные кривые: $I(q) = A \cdot \exp((qb)^2/3) + P \cdot q^{(-N)}$ в области малых переданных импульсов (больших масштабов) и $I(q) = R \cdot q^M + S \cdot \exp(-2 \cdot (q - L)^2/F^2)$ в области больших переданных импульсов (малых масштабов). Показано, что показатель степени N близок к 2, что соответствует логарифмическому фракталу, функция Гаусса, описывающая поведение кривой в области больших переданных импульсов, соответствует хвои. Показано, что поскольку на крупных масштабах лапы ели формируются с учётом покрывающей их хвои, подчиняясь закону логарифмического фрактала в двумерном пространстве, для них выполняется правило, сохранения площади ветвей с иголками до и после ветвления.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-12-00188.

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature. New York: Freeman, 1983.
2. Pustovoit P.M., Yashina E.G., Pshenichnyi K.A., and Grigoriev S.V.// Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020, Vol. 14, No. 6, pp. 1231–1238.
3. Grigoriev S.V., Shnyrkov O.D., Pustovoit P.M., Iashina E.G., and Pshenichnyi K.A. Experimental evidence for logarithmic fractal structure of botanical trees// Phys. Rev. E 105, 044412.

Индукцированный мутагенез при низких дозах УФ-света зависит от репаративной ДНК-полимеразы «эта»

Е.А. Алексеева^{1,2}, И.И. Скобелева¹, Т.А. Евстюхина^{1,2}, И.В. Бахланова¹,

Д.В. Федоров¹, В.Т. Пешехонов^{1,2}, В.Г. Королев^{1,2}

E-mail: alekseeva_ea@npri.nrcki.ru

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Полимераза «эта» дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* является ошибочной ДНК-полимеразой, она функционирует в ошибочной ветви пострепликативной репарации. Её субстратом, являются пиримидиновые димеры [1] и способна вставлять напротив димеров тимина – аденины. Но из-за низкой процессивности и отсутствия редакторской способности у полимеразы «эта», могут возникать ошибки на вновь синтезированной ДНК.

Полимеразу «эта» кодирует ген *RAD30*, мутации в данном гене или его инактивация у человека могут способствовать предрасположенности к вариантной форме пигментной ксеродермы и раку кожи [2].

Ранее мы уже изучали влияние инактивации гена *RAD30* на УФ-индуцированный мутагенез у дрожжей *S. cerevisiae* при высоких дозах УФ-света [3]. Наши данные показали, что инактивация гена *RAD30* при высоких (56, 112, 168 Дж/м²) дозах УФ-лучей практически не влияет на УФ-индуцированный мутагенез и выживаемость штамма *rad30Δ* и сопоставима с таковыми у штамма дикого типа. Тем не менее в другой работе Козмина и др. [4], было показано, что мутация *rad30Δ* у дрожжей *S. cerevisiae* приводит к повышенному УФ-индуцированному мутагенезу. Это было неожиданно, и мы решили проверить в чем именно состоит различие в наших работах. Оказалось, что Козмин с соавторами, исследовали УФ-индуцированный мутагенез мутанта *rad30Δ* при более низких дозах УФ-света, чем мы.

Поэтому, нами было принято решение исследовать влияние инактивации гена *RAD30* на УФ-индуцированный мутагенез при дозах 7, 14 и 21 Дж/м². Полученные нами данные показали, что при низких дозах УФ-излучения мутация *rad30Δ* приводит к повышенной частоте УФ-индуцированного мутагенеза по сравнению со штаммом дикого типа. Практически такой же эффект мы наблюдали у других наших мутантов с делециями по генам *HIM1*, *HSM3* и *HIF1*, различие заключалось в том, что при низких дозах облучения УФ-светом частота УФ-индуцированного мутагенеза у этих мутантов была ниже, чем при их облучении высокими дозами.

Данные полученные в нашем исследовании свидетельствуют о том, что существуют различия в регуляции УФ-индуцированного мутагенеза при низких и высоких уровнях доз УФ-лучей. При этом полимеразы «эта» играет ключевую роль в УФ-индуцированном мутагенезе при низких дозах облучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-24-00119

1. Johnson R.E., et al. Efficient bypass of a thymine-thymine dimer by yeast DNA polymerase Pol η // *Science*. 1999. V.283. №5404. P.1001-1004
2. Gali V.K., et al. Translesion synthesis DNA polymerase η exhibits a specific RNA extension activity and a transcription-associated function // *Sci Rep*. 2017. V.7. №1. P.13055.
3. Alekseeva E.A., et al. Participation of the *HIM1* gene of yeast *Saccharomyces cerevisiae* in the error-free branch of post-replicative repair and role Pol η in *him1*-dependent mutagenesis // *Curr Genet*. 2021. V.67. №1. P.141-151.
4. Kozmin S.G., Pavlov Y.I., Kunkel T.A., Sage E. Roles of *Saccharomyces cerevisiae* DNA polymerases Pol η and Pol ζ in response to irradiation by simulated sunlight // *Nucl.Acids Res*. 2003. 2003. V.31 P. 4541-4552. doi:10.1093/nar/gkg489

Роль генов *RAD9* и *DOT1* в индуцированном мутагенезе дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*

И.И. Скобелева¹, Т.А. Евстюхина^{1,2}, Е.А. Алексеева^{1,2},
В.Т. Пешехонов^{1,2}, Д.В. Федоров¹, В.Г. Королев^{1,2}

E-mail: skobeleva_ii@npri.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Ленинградская область, Гатчина, 188300 Россия

²Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Ленинградская область, Гатчина, 188300 Россия

При завершении репарации ДНК важную роль играют процессы, связанные с восстановлением нормальной структуры хроматина. Некорректная сборка хроматина может привести к геномным перестройкам, которые, в свою очередь, могут быть причиной развития многих болезней, включая рак. Ранее мы обнаружили, что нарушения правильности сборки нуклеосом и их ремодулирования в процессе репаративной сборки хроматина приводят к повышенному уровню мутагенеза. В настоящей работе мы показали, что нарушение сайта связывания адапторного белка Rad9 с ДНК в результате инактивации гена *DOT1* нивелирует *hif1Δ*-специфический мутагенез, который является следствием некорректной репаративной сборки нуклеосом. Отсутствие белка Rad9 при нормальных условиях роста и при обработке низкими дозами УФ-лучей приводит к абберантной активации комплекса RNR. При этом дальнейшее увеличение дозы УФ-облучения, практически не влияет на экспрессию *RNR3*.

RAD9 был первым чекпойнтным геном, обнаруженным у дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*. Было показано, что он контролирует индуцированную радиацией остановку клеточного цикла в фазе G2/M [2]. Rad9 необходим для эффективной реакции на повреждение ДНК на протяжении всего клеточного цикла. Сборка Rad9 на хроматине после повреждения ДНК стимулируется модификациями гистонов, которые создают места посадки Rad9 на хроматин, запуская активацию чекпойнта. Фосфорилирование Rad53 зависит от олигомеризации Rad9; однако взаимосвязь между этими молекулярными детерминантами и их функциональное значение плохо изучены. Существует параллельный путь, независимый от модификаций гистонов и регулируемый активностью CDK1, что позволяет осуществить активацию чекпойнта в отсутствие связывания Rad9 с хроматином.

Привлечение Rad9 к хроматину требует связывания парных Tudor-доменов с гистонами H3 диметилированным по K79 с помощью гистон метилтрансферазы Dot1 [3]. После связывания Rad9 с хроматином, происходит взаимодействие Rad9, который активирует быстрое фосфорилирование Rad53.

Ранее мы изучили роль гена *DOT1* в мутационном процессе [3]. В настоящей работе, мы подтвердили, что мутация *dot1Δ* при высоких дозах УФ-лучей в значительной степени подавляет индуцированный мутагенез и показывает достоверно большую чувствительность к летальному действию излучения по сравнению со штаммом дикого типа, что соотносимо с информацией, представленной в нашей предыдущей работе [1].

Также мы показали, что при низких дозах, по выживаемости мутант *dot1Δ* не отличался от штамма дикого типа, а его УФ-индуцированный мутагенез был незначительно понижен по сравнению со штаммом дикого типа. При низких дозах более чувствительность к УФ-излучению, таким образом *DOT1* влияет на понижение УФ-индуцированного мутагенеза и это понижение особо выражено при низких дозах.

Мы инактивировали ген *RAD9*, изучили выживаемость и УФ-индуцированный мутагенез у мутанта *rad9Δ* при низких и высоких уровнях доз УФ-лучей. В данной работе показали, что *rad9Δ* высокую УФ-чувствительность при всех использованных дозах. Частота УФ-индуцированного мутагенеза при низких дозах у мутанта *rad9Δ* была в два раза ниже по сравнению со штаммом дикого типа. При высоких дозах оба штамма показали одинаковую

частоту мутагенеза. Таким образом *RAD9* имеет тенденцию к понижению УФ-индуцированного мутагенеза и это понижение особо выражено только при низких дозах.

Мутант *dot1Δ* показал значительно меньшую УФ-чувствительность по сравнению с мутантом *rad9Δ* и примерно равную частоту УФ-индуцированного мутагенеза. И в отношении УФ-индуцированного мутагенеза характер ответа был примерно одинаковым у данных мутантов. Тем не менее, при высоких дозах УФ-лучей частота мутагенеза у мутанта *dot1Δ* была понижена примерно в два раза [4], в то время как у мутанта *rad9Δ* она не отличалась от штамма дикого типа.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-24-00119

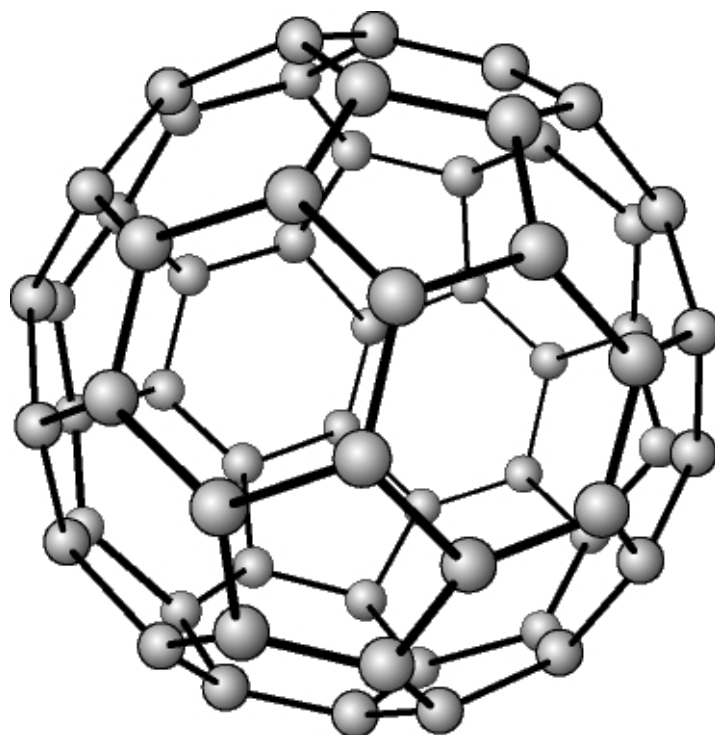
Настоящая работа не содержит каких-либо исследований с использованием в качестве объекта животных.

Настоящая работа не содержит каких-либо исследований с участием в качестве объекта людей.

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. Evstyukhina T. A. et al. The Role of Various Subunits of the INO80 Remodeling Complex in Chromatin Repair Assembly in Yeast *Saccharomyces cerevisiae* // Russian Journal of Genetics. – 2024. – Т. 60. – №. 7. – С. 857-868.
2. Weinert T.A., Hartwell L.H. The RAD9 gene controls the cycle response to DNA damage checkpoint in *Saccharomyces cerevisiae* // Science. 1988. V. 241. P. 317-322. doi: 10.1126/science.3291120
3. Wysocki R., Javaheri A., Allard S. et al. Role of Dot1-dependent histone 3 methylation in G₁ and S phase DNA damage checkpoint functions of Rad9 // Mol. Cell. Biol. 2005. V. 25. P. 8430-8443. doi: 10.1128/MCB.25.19.8430-8443.2005
4. Кожина Т.Н., Евстюхина Т.А., Пешехонов В.Т. и др. Гистон-метилазы Dot1 и Set2 контролируют уровень спонтанного и УФ-индуцированного мутагенеза в дрожжах *Saccharomyces cerevisiae* // Генетика. 2016. Т. 52. №3. С. 300–310. (Kozhina T.N., Evstyukhina T.A., Peshekhonov V.T. et al. Dot1 and Set2 Histone Methylases Control the Spontaneous and UV-Induced Mutagenesis Levels in the *Saccharomyces cerevisiae* Yeasts // Russ. J. Genet. 2016. V. 52. №3. P. 300–310. PMID: 27281850)

Материаловедение и наноструктурированные материалы



Высокопрочные геополимерные материалы на основе алюмосиликатов с различной морфологией частиц

А.А. Алексеев, Ю.А. Аликина, О.Ю. Голубева

E-mail: Andre_alekseev_2017@mail.ru

Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИХС, Санкт-Петербург, Россия

Геополимеры являются аморфными неорганическими материалами, которые могут быть получены в результате взаимодействия раствора щелочного активатора и термоактивированного алюмосиликатного прекурсора природного или техногенного происхождения (минералы подгруппы каолинита, бентонит, зола-уноса, красный шлам, шлаки металлургических производств). Общая формула геополимера может быть представлена в виде: $M_n[-(SiO_2)_z - AlO_2-]_n \cdot wH_2O$, где M – катион (Na^+ , K^+), n – степень поликонденсации, $z \geq 1$. Данные материалы характеризуются высокими прочностными свойствами, термостабильностью, химической стойкостью по отношению к агрессивным химическим средам. Основными областями применения геополимеров являются экологичное строительство с применением аддитивных технологий, получение покрытий, носителей катализаторов, пористых, огнеупорных, вяжущих и биосовместимых материалов, а также иммобилизация радиоактивных и токсичных отходов [1], что обуславливает их значимость для отечественного научно-технологического суверенитета.

Синтез геополимеров включает стадии растворения алюмосиликатного прекурсора в щелочной среде и поликонденсацию олигомерных силатных ионов, с образованием трехмерной полисилатной сети. На интенсивность протекания реакции образования геополимерной матрицы и механические свойства получаемых материалов существенное влияние оказывает химический состав, размеры и морфология частиц алюмосиликатного прекурсора [2].

Целью работы являлось исследование влияния морфологии и фактора формы частиц прекурсора на механические свойства геополимеров на примере нанотрубок галлуазита, природного и синтетического каолинита с пластинчатой морфологией частиц. Синтезированные геополимерные материалы были охарактеризованы с использованием различных физико-химических методов анализа: РФА (MAXima_X XRD-7000); СЭМ (Tescan Vega 3SBH); измерение удельной поверхности и объема пор (Quantachrome NOVA 1200e); измерение прочности на сжатие и изгиб (Shimadzu AG-X Plus); измерение насыпной плотности.

По результатам исследования было установлено, что морфология и размеры частиц существенно влияют на насыпную плотность прекурсора, объемную долю твердой фазы и соотношение ж:тв для геополимерной пасты. Прочность на сжатие геополимеров возрастает в ряду: метакаолинит синтетический (26 МПа, фактор формы 3,9) < метакаолинит (56 МПа, фактор формы 1,4) < метагаллуазит (85 МПа, фактор формы 6,5). Прочность геополимеров на сжатие имеет экстремум при определенном значении SiO_2/Al_2O_3 , которое определяется природой и морфологией прекурсора. Прочность на изгиб образцов возрастает с увеличением значения фактора формы: метакаолинит (6 МПа) < синтетический метакаолинит (15 МПа) < метагаллуазит (16 МПа). Полученные данные свидетельствуют о высоком потенциале применения геополимерных материалов в различных отраслях промышленности.

1. H. Castillo, H. Collado, T. Droguett, S. Sánchez, M. Vesely, P. Garrido, S. Palma, Factors Affecting the Compressive Strength of Geopolymers: A Review // Minerals. 2021. V. 11. ID: 1317.
2. B. Zhang, T. Yu, H. Guo, J. Chen, Y. Liu, P. Yuan, Effect of the SiO_2/Al_2O_3 Molar Ratio on the Microstructure and Properties of Clay-based Geopolymers: A Comparative Study of Kaolinite-based and Halloysite-based Geopolymers // Clays Clay Miner. 2022. V. 70. P. 882–902.

Исследование воздействия УФ-облучения на фолиевую кислоту в составе конъюгата с фуллереном C₆₀ и поливинилпирролидоном

Д.В. Байков^{1,2}, А.В. Титова^{1,2}, В.В. Бахметьев¹, В.П. Седов², Д.Н. Орлова², А.А. Василевская^{1,2}, А.А. Борисенкова^{1,2}

E-mail: baykovdm42@gmail.com

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Фолиевая кислота (ФК) является перспективным нацеливающим агентом в составе систем адресной доставки лекарственных препаратов к опухолевым клеткам. Так, ранее было показано, что конъюгат ФК с фуллереном C₆₀ и поливинилпирролидоном (ПВП) в большей степени накапливался в опухолевых клетках с повышенной экспрессией фолатных рецепторов [1]. Однако, фолиевая кислота чувствительна к свету и воздействию ионизирующего излучения [2,3]. При этом, продукты фотолиза оказывают фотосенсибилизирующее действие на процесс разложения ФК. Соответственно, эти процессы могут ограничивать использование ФК в качестве нацеливающего лиганда в системах адресной доставки лекарственных препаратов. В тоже время фуллерен C₆₀, известный своими антиоксидантными свойствами, может улучшать фотостабильность ФК в составе конъюгата ФК-ПВП-C₆₀, как это было показано для других антиоксидантов [4].

Целью данной работы была оценка воздействию УФ-облучения на стабильность ФК в составе конъюгатов ФК-ПВП-C₆₀ с содержанием фуллерена от 2,8 до 10 % масс.

Синтез конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ и его характеристика были описаны ранее [1]. Для исследования фотолиза ФК водные растворы конъюгатов облучали одновременно двумя лампами с эффективными диапазонами излучений 300-400 нм (мощность 7 Вт/м²) и 205-315 нм (мощность 11 Вт/м²) в течение 0–120 мин. Продукты фотолиза ФК исследовали с помощью УФ- и флуоресцентной спектроскопии.

Установлено, что продукты фотолиза ФК в составе конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ имеют более высокую интенсивность флуоресценции и сдвиг ее максимума по сравнению с необлученным конъюгатом. Показано, что наиболее чувствительной к УФ-облучению оказалась связь между 6-метилптеринном и п-аминобензойной-глутаминовой кислотами в составе ФК, а наиболее вероятными продуктами фотолиза являются п-аминобензоилглутаминовая кислота и 6-формилптерин, что характерно и для нативной ФК. Выявлено антиоксидантное действие фуллерена C₆₀: степень разложения ФК в составе конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ коррелировала с содержанием фуллерена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-73-01085.

1. Borisenkova A. A. et al. Fullerene C₆₀ Conjugate with Folic Acid and Polyvinylpyrrolidone for Targeted Delivery to Tumor Cells // International Journal of Molecular Sciences. 2024. V. 25. No. 10. P. 5350.
2. Attaf S. E., Hasan H. M. A. Effect of UV irradiation on folic acid drug // J. Pharmacy and Pharm. Sci. 2019. V. 8. No. 8. P. 103-114.
3. Araújo M. M. et al. LC/MS/MS identification of some folic acid degradation products after E-beam irradiation // Radiation Physics and Chemistry. 2012. V. 81. No. 8. P. 1166-1169.
4. Wusigale et al. Mechanism for inhibition of folic acid photodecomposition by various antioxidants // Journal of agricultural and food chemistry. 2019. V. 68. No. 1. P. 340-350

Комплексный анализ процесса эволюции упрочняющих фаз в жаропрочном сплаве HP40NbTi методами электронной микроскопии

Ю.А. Беликова

E-mail: npk3@crism.ru

НИИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

Анализ существующих жаропрочных сплавов позволяет считать, что по эксплуатационным характеристикам и экономическим показателям наиболее перспективными для применения в нефтехимической промышленности являются аустенитные железо-хромоникелевые HP-сплавы [1]. Ввиду непосредственной зависимости жаропрочности от микроструктуры материала, наиболее значимым является оценка стабильности структурных составляющих материалов, используемых в нефтепромышленности, в частности центробежнолитых железо-хром-никелевых труб [2]. Современные методы электронной микроскопии позволяют осуществлять последовательный анализ морфологии, строения и элементного состава фаз на различных масштабных уровнях.

В работе исследовался многокомпонентный аустенитный сплав с карбидным упрочнением на основе системы Fe-Ni-Cr HP серии в литом состоянии и после длительной выдержки при температуре 900°C. Методами растровой электронной микроскопии изучены морфологические особенности строения, а также элементный состав упрочняющих частиц на основе ниобия. В образце в исходном состоянии показано, что ниобиевые частицы являются фрагментированными и представляют собой кластеры, состоящие из отдельных кристаллитов неправильной формы. Это было подтверждено при построении карт разориентировок в режиме дифракции обратно рассеянных электронов (ДОРЭ, EBSD) на поперечных шлифах. После длительной высокотемпературной выдержки при температуре 900 °С в течение 500 ч, упрочняющие частицы карбонитрида ниобия в структуре сплава становятся многофазными поликристаллами, при этом каждая фаза в частице формирует отдельный слой. Установлено, что температура активирует фазовое превращение ниобиевой частицы в интерметаллическую G-фазу переменного состава с образованием переходной области промежуточной G'-фазы.

Исследования образцов в литом состоянии методами просвечивающей электронной микроскопии показали, что центрами кристаллизации ниобиевых фаз могут являться неметаллические включения различной природы, при этом формирующиеся на их поверхности фазы имеют выраженный градиент концентрации ниобия и титана

На тонких фольгах, извлеченных из образцов после термического старения, было установлено, что трансформация карбонитридных фаз вследствие воздействия температурного поля происходит послойно с образованием переходного слоя, основу которого составляет промежуточная G'-фаза. Детальное изучение дисперсных частиц в этой области показало, что в переходном слое остаются нерастворенные островки первичного карбонитрида ниобия с повышенным содержанием титана.

Комплексное систематическое изучение многофазных материалов методами электронной микроскопии на макро- и микроуровнях позволяет получать всестороннюю информацию об их структуре, химическом и фазовом составе. Этот подход позволяет не только глубже понять сплавы, но и помогает разрабатывать и улучшать материалы для повышения их рабочего ресурса.

1. Garbiak M., Jasiński W., Piekarski B. Materials for reformer furnace tubes. History of evolution // Arch. FoundryEng. – 2011. – Vol. 11. – Is. 2 spec. – P. 47-52.
2. Kondrat'ev S. Y., Belikova Y. A., Zabavicheva E. V. Experimental Study of the Structure of Nb-Based Primary Carbides in Cast Refractory Alloys HP40NbTi //Metal Science and Heat Treatment. – 2022. – V. 64. – №. 7-8. – P. 370-378

Повышение качества сварных соединений коррозионностойких алюминиево-магниевых сплавов при лазерной сварке

Ю.Л. Бойченко, Е.А. Алифиренко, З.Е. Чижов

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, России

Благодаря коррозионной стойкости, хорошей свариваемости и высоким механическим свойствам термически неупрочняемые алюминиево-магниевые сплавы получили широкое применение в судостроении при изготовлении корпусных и надстроечных конструкций кораблей и судов.

На сегодняшний день наиболее распространенными способами сварки алюминиево-магниевых сплавов в условиях сборочного производства являются сварка неплавящимся электродом и полуавтоматом в среде защитных газов. Основными недостатками данных способов являются высокие сварочные напряжения и деформации конструкции, что особенно характерно при сварке тонколистовых металлоконструкций толщиной от 2,0 до 6,0 мм.

Альтернативой традиционным способам дуговой сварки может быть лазерная сварка, которая находит применение в аэрокосмической, автомобильной и других отраслях промышленности, в том числе при сварке тонкостенных материалов.

Однако, по данным публикаций [1-3], получение качественных сварных соединений этим способом возможно при сварке алюминиевых сплавов преимущественно с пониженным содержанием Mg до 5,5%.

Судостроительные конструкционные сплавы серии Al-Mg, в особенности такие марки как 1561, 1565ч с содержанием Mg – до 6,5%, обладают высокой склонностью к порообразованию при лазерной сварке. Это обусловлено существенным повышением растворимости водорода в расплаве при сварке сплавов с высоким содержанием магния.

В рамках работы было выявлено, что снижения порообразования при лазерной сварке листового проката алюминиевого сплава 1565ч толщиной 2,8 мм можно достичь путем значительного повышения мощности источника, а также скорости сварки. Также на качество соединения влияют: способ разделки, предварительный подогрев и повышение погонной энергии в комплексе с увеличением осциллирования лазерного луча.

По результатам работы планируется внедрить лазерную сварку при сборке поперечного набора в сварных крупногабаритных облегченных панелях (СКО-панелях) с толщиной полотна от 2,0 до 6,0 мм, производство которых методом сварки трением с перемешиванием в настоящее время освоено в НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей». Внедрение лазерной сварки при сборке поперечного набора позволит получать изделия нового типа – объемные плоскостные секции с высокой степенью завершенности.

1. J P Weston, I A Jones, E R Wallach Laser Welding of Aluminium Alloys using Different Laser Sources // CISFFEL6, 6th International Conference on Welding and Melting by Electron and Laser Beams, Toulon, France, 15-19 June 1998
2. G Verhaeghe Laser Welding Automotive Steel and Aluminium // meeting on 'Laser in the automotive and sheet metal industries', TWI, Great Abington, UK on 13 July 2000
3. FAQ Is Laser Welding used in the Manufacture of Aluminium Alloy Airframe Structures? [Электронный ресурс]: TWI, URL: <http://www.twi-global.com/technical-knowlege/faq-is-laser-welding-used-in-the-manufacture-of-aluminium-alloy-airframe-structures> (дата обращения 15.05.24)

Моделирование графитового фильтра для установки нейтронной текстурной дифракции

К.И. Бусуек¹, А.А. Павельева²

E-mail: kib7@tpu.ru

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Использование пиролитического графита (PG) в качестве кристалла монохроматора в установке нейтронной текстурной дифракции оказывается эффективным благодаря высокой отражательной способности около 90 % при необходимости получения среднего разрешения и является отличным решением, когда исследуемый образец имеет большое межплоскостное расстояние более 1,5 Å [1].

Однако, в PG монокристаллы выстраиваются таким образом, что в их гексагональной структуре оси *c* параллельны, а оси *a* выстроены хаотично, следовательно отражение нейтронов происходит от плоскости (001), которые удовлетворяют уравнению Вульфа-Брэгга, и из-за высокой отражательной способности выполняется для нескольких порядков. В кристаллах пиролитического графита отражающая способность обусловлена отражением от плоскости (002) и ее более высоких порядков, когда кристалл PG вырезан перпендикулярно его оси *c* [2]. Поэтому для эффективного использования PG необходим нейтронный фильтр, который исключит наличие старших порядков в пучке нейтронов, приходящем на образец.

Нейтронные фильтры применяются для исключения быстрых нейтронов и гамма-излучения из первичного пучка или уменьшения вклада высших порядков в пучке, и в общем случае удаляет нежелательное излучение из пучка, сохраняя оптимальное пропускание нейтронов нужных энергий и длин волн [3]. В качестве нейтронного фильтра был выбран графитовый фильтр, который служит эффективным фильтром второго или третьего порядка и может быть настроен путем небольшой переориентации в сторону от оси *c*.

Таким образом, для решения вышеперечисленных проблем и упрощения подбора параметров узла нейтронного фильтра установки нейтронной текстурной дифракции оказывается эффективным использование моделирования методом трассировки лучей Монте-Карло с использованием программы McStas.

По результатам моделирования была определена толщина графитового фильтра, равная 7 см, при которой наблюдается эффективное соотношение между интенсивностью потока нейтронов, приходящих на образец, и разрешением установки. Таким образом, при данной толщине фильтра происходит достаточное поглощение пика интенсивности нейтронов второго порядка отражения от монохроматора PG и сохранение интенсивности с необходимой для эксперимента длиной волны нейтронов. Предполагается, что влияние нейтронов второго порядка на общую картину спектра рассеянных образцом нейтронов будет соизмеримо с шумом и вычтено во время обработки результатов эксперимента.

1. Adib M. et al. Characteristics of pyrolytic graphite as a neutron monochromator. 2011.
2. Em V. T. et al. A double-crystal monochromator for neutron stress diffractometry // Instruments and Experimental Techniques. 2017. V. 60. P. 526-532.
3. Anderson I. S. et al. Neutron techniques // International Tables for Crystallography. 2006. P. 430-487

Разработка принципиальной технологии угловой СТП невращающимся уступом с подачей присадочного материала

А.А. Бяков, Е.А. Алифиренко

E-mail: npek@crism.ru

НИИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

НИИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» является изготовителем сварных крупногабаритных облегченных панелей (СКО-панелей) из тонкостенных прессованных и катаных полуфабрикатов методом сварки трением с перемешиванием (СТП). СКО-панели применяются взамен цельнопрессованным панелям при изготовлении корпусных и надстроечных конструкций для высокоскоростной техники морского и речного назначения. В настоящий момент СКО-панели являются одобренным материалом в РМРС и РКО, из них построены судно на воздушной подушке СПВГС «Хаска-10» и высокоскоростные катера HSC150B.

СКО-панели изготавливаются из тонкостенного прессованного профиля с толщиной стенки от 1,5 до 6,0 мм, производство которых освоено лишь на двух металлургических предприятиях. В условиях загруженности металлургических предприятий существенно повышаются стоимость и сроки поставки готовой продукции, что в свою очередь влияет на сроки поставки СКО-панелей, являясь ограничением для широкого их применения.

Зарубежные исследования угловой СТП невращающимся уступом показывают успешные результаты по получению соединений из сплавов различных систем легирования с геометрией, которую невозможно получить методом прессования. [1].

В ЦНИИ КМ «Прометей» в 2023 году была разработана технология по получению профилированных полуфабрикатов методом угловой СТП. В формировании шва происходит за счет основного металла, что приводит к образованию концентратора напряжений.

Применение невращающегося уступа позволяет реализовать подачу материала к области соединения, что приводит к увеличению толщины углового шва и устранению концентратора [2]. При этом можно подбирать присадочный материал для получения требуемых коррозионных и механических свойств соединения.

Результатом работы стали усовершенствованный уступ с возможностью подачи присадочного материала диаметром 4,0 мм и его контролируемого нагрева, разработанная принципиальная технология угловой СТП невращающимся уступом тонкостенных алюминиевых полуфабрикатов с подачей присадочного материала, были получены бездефектные сварные пробы и их макроструктура.

Внедрение технологии по созданию тонкостенных сварных полуфабрикатов позволит создавать СКО-панели с новыми технологическими и конструкционными свойствами для применения в различных отраслях промышленности. Изготовление сварного профилированного полуфабриката угловой СТП сократит затраты на изготовление и сроки производства СКО-панелей.

1. Mertinger V., Varbai B., Adonyi Y. etc. Microstructure evaluation of dissimilar AA2024 and AA7050 aluminum joints made by corner stationary-shoulder friction stir welding // Weld World. 2022. № 66. pp. 1623–1635.
2. Beckman A., Sundstrom M., Development of Stationary Shoulder for Friction Stir Welding // Master's Thesis. 2014.

Получение композиционных мембран на основе перфторированного сополимера, модифицированного поливиниловым спиртом, сшитым сульфоянтарной кислотой

В.Д. Вавилова¹, О.Н. Примаченко¹, О.С. Лёзова², Е.А. Мариненко¹, С.В. Кононова¹

E-mail: mao232698916@mail.ru

¹Филиал федерального государственного бюджетного учреждения

«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» – Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Россия

²Филиал федерального государственного бюджетного учреждения

«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов, Санкт-Петербург, Россия

Полимер-электролитные мембранные топливные элементы несколько последних десятилетий находятся в центре внимания как мощные и экологически чистые источники энергии нового поколения, позволяющие заменить углеводородное топливо, загрязняющее окружающую среду выбросами CO₂, на альтернативное топливо – водород или спирты. Модификация химической структуры протонообменных мембран (ППМ) направлена на повышение комплекса физико-химических, электрохимических, диффузионных, термостабилизационных свойств, возможность удержания необходимого влагосодержания мембран при повышенных температурах [1]. ПВС является одним из перспективных органических модификаторов для ППМ. Высокая гидрофильность ПВС и его способность удерживать воду при высоких температурах являются полезными свойствами при работе композиционных ППМ в топливном элементе. Сшивка ПВС поперечными связями позволяет регулировать влагосодержание, степень набухания, термическую, химическую и механическую стабильность полимера в составе композита, а также вводить кислотные функциональные группы из сшивающего агента [2].

Ранее нами было рассмотрено влияние типа сшивающих агентов для поливинилового спирта (ПВС): эпихлоргидрина (ЭХГ) и глутарового альдегида (ГА) на структуру, морфологию, термостабильность, электрофизические свойства композиционных мембран, содержащих отечественный перфторированный сополимер LSC - аналог Nafion[®] и ПВС [3]. Перспективным направлением при сшивке ПВС для ППМ является использование сульфосукциновой кислоты (ССК). Использование ССК при сшивке ПВС позволяет вводить в состав композита LSC дополнительные сульфокислотные группы, не участвующие в процессе сшивки и позволяющие увеличивать ионообменную емкость композита.

Поверхностное сопротивление и проницаемость мембран ПВС/ССК возрастают с увеличением времени термической обработки при температурах 100-140°C, что объясняется увеличением степени сшивки ПВС. Введение ПВС, сшитого ССК, в состав композиционной мембраны увеличивает её влагосодержание и протонную проводимость.

1. Kusoglu A., Weber A. Z. New Insights into Perfluorinated Sulfonic-Acid Ionomers // Chem. Rev. 2017. Vol. 117. P. 987-1104.
2. Rhim J., Park H., Lee C., Jun J., Kim D., Lee Y. Crosslinked poly(vinyl alcohol) membranes containing sulfonic acid group: proton and methanol transport through membranes // J. Membr. Sci. 2004. Vol. 238. P. 143-151.
3. Primachenko O.N., Marinenko E.A., Gubanova G.N. et al. Structure and properties of composite perfluorinated sulfonic acid membranes modified with cross-linked poly(vinyl alcohol) // Rus. J. Gen. Chem. 2024. V. 94. P. 853-865.

Влияние легирования Cu на фазово-структурное состояние и магнитные свойства сплавов $Mn_{55-x}Al_{36}Ga_9Cu_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4, 5$)***Н.М. Вазжинский, К.С. Нечаев, А.С. Фортуна, М.В. Горшенков***

E-mail: nikita_vazhinskiy@mail.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия

Магнитные сплавы Mn-Al-Ga представляют большой интерес как потенциальная альтернатива высокопроизводительным, но дорогим редкоземельным магнитам и малопроизводительным, но дешевым ферритам [1-2]. В настоящее время ключевой задачей является разработка методов обработки и легирования для достижения оптимальных магнитных свойств сплавов на основе Mn-Al-Ga. Теоретические расчеты показывают высокую перспективу этих сплавов, однако на практике эти свойства пока не реализованы. Известно, что добавление меди в сплавы системы Mn-Al повышает их обрабатываемость [3], что важно для оптимизации магнитных свойств. Однако на сегодняшний день отсутствуют данные о влиянии меди на фазово-структурное состояние и магнитные свойства сплавов Mn-Al-Ga. Целью данной работы является исследование зависимости свойств и структуры сплавов Mn-Al-Ga от концентрации добавки меди.

Сплавы с номинальным составом $Mn_{55-x}Al_{36}Ga_9Cu_x$ (где $x = 0, 1, 2, 3, 4, 5$) были получены методом индукционной плавки. В сплаве $Mn_{51}Al_{36}Ga_9Cu_4$ литьем удалось добиться около 98% объема ферромагнитной фазы. После гомогенизационного отжига и закалки с критической скоростью образцы состояли преимущественно из ферромагнитной τ -фазы и фазы γ_2 . Анализ методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) показал смещение пиков фазовых превращений в сторону более низких температур с увеличением концентрации меди. В результате отжига в сплавах с содержанием меди до 3 ат.% удалось получить высокую концентрацию τ -фазы (до 93,9 % по объему). В сплавах с содержанием меди 4 и 5 ат.% превращение из γ_2 в τ -фазу происходило неактивно из-за образования химической неоднородности внутри фазы γ_2 . Анализ магнитных свойств сплавов $Mn_{55-x}Al_{36}Ga_9Cu_x$ (где $x = 1, 2, 3, 4, 5$) в отожженном состоянии показал высокие значения максимальной намагниченности (до 369 кА/м), сравнимые с максимальной намагниченностью, наблюдаемой в тройных сплавах Mn-Al-Ga. Исследования микроструктуры подтвердили образование немагнитной прослойки γ_2 по границам зерен ферромагнитной фазы при содержании меди 4 и 5 ат.%.

Исследование выполнено в рамках гранта Российского Научного Фонда № 23-13-00161.

1. Mix T. et al. Alloying with a few atomic percent of Ga makes MnAl thermodynamically stable //Acta Materialia. – 2017. – Т. 128. – С. 160-165.
2. Mix T., Woodcock T. G. Advanced thermal stability investigations of the Mn–Al-Ga system //Results in Materials. – 2020. – Т. 5. – С. 100068.
3. Florian J. et al. The Influence of Cu-Additions on the Microstructure, Mechanical and Magnetic Properties of MnAl-C Alloys //Scientific Reports (Nature Publisher Group). – 2020. – Т. 10.

Влияние растворителей на наноструктуру полимера на основе ацетата целлюлозы при электрогидродинамической обработке

А.Э. Василевская, А.И. Мошков, А.И. Кецко, А.А. Пономарева

E-mail: 336429@niuitmo.ru

Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Применение топливных элементов в энергетической сфере обладает перспективами преодоления вызовов, связанных с изменением климата и загрязнением атмосферы. Наиболее распространёнными являются топливные элементы с протонообменной мембраной. Один из популярных материалов для таких мембран — Nafion. Полимеры, схожие по составу с Nafion, имеют значительные недостатки в отношении физико-химических свойств и отличаются высокой стоимостью [1]. Исследователи ищут альтернативные материалы для создания мембран с улучшенными свойствами и низкой ценой производства. Особое внимание уделяется биополимерам. Один из перспективных материалов — ацетат целлюлозы. Мембраны из ацетата целлюлозы обладают низкой стоимостью, лучшей протонпроводимостью, более высокой гидрофильностью по сравнению с Nafion [2]. Метод электрогидродинамической обработки позволяет создавать материалы из нановолокон с контролируемыми свойствами. Этот метод имеет преимущества при создании мембран из биополимеров, получать нановолокна материала контролировать толщину волокон и эффективное использование материала. Данный способ может быть использован для создания мембран топливных элементов [3].

Исследовались растворы ацетата целлюлозы, ацетона и N,N-диметилформамида. Соотношение растворителей составило 4:6 и 6:4. Полученные 6%, 8% и 12% процентные растворы ацетата целлюлозы были изучены при помощи ротационного реометра Physica MCR 502, Anton Paar (Австрия) с системой "цилиндр в стакане" CC27 для измерения напряжения сдвига. Скорость сдвига варьировалась от 0,1 до 1000 с⁻¹ при постоянной температуре раствора 25,0 ± 0,2 °С, поддерживаемой с использованием термостатического модуля С-PTD200 с элементом Пельтье. Электрогидродинамическая обработка раствора ацетата целлюлозы осуществлялась с помощью установки электрогидродинамического распыления NANON-01A, Месс (Япония), с распылением раствора через иглу на алюминиевый коллектор при комнатной температуре и различными скоростями подачи раствора. Морфология поверхности полученных наночастиц была исследована с помощью сканирующего электронного микроскопа Vega-3, Tescan (Чехия).

Изучение морфологии полимера, полученного при электрогидродинамической обработке разных растворов ацетата целлюлозы, позволило установить оптимальные параметры процесса и характеристики растворов для создания мембран. В результате электрогидродинамической обработки были получены сферические наночастицы ацетата целлюлозы. При увеличении концентрации наблюдалось формирование волоконных объектов. Переход от распыления к образованию нановолокон из раствора ацетата целлюлозы может быть связан с превышением критического количества макромолекул в растворе, что приводит к формированию волоконной структуры и переформированию наночастиц.

Результаты исследования могут помочь снизить затраты на производство мембран и улучшить их качество, что сделает топливные элементы более доступными, улучшит их эффективность и долговечность, увеличит интерес к возобновляемым источникам энергии.

1. Abdelkareem M. A. et al. Environmental aspects of fuel cells: A review //Science of The Total Environment. – 2021. – Т. 752. – С. 141803.
2. Muhmed S. A. et al. Emerging chitosan and cellulose green materials for ion exchange membrane fuel cell: a review //Energy, Ecology and Environment. – 2020. – Т. 5. – С. 85-107.
3. Wilk S., Benko A. Advances in fabricating the electrospun biopolymer-based biomaterials //Journal of Functional Biomaterials. – 2021. – Т. 12. – №. 2. – С. 26.

Сорбционная очистка дымовых газов от CO₂ синтетическими и природными алюмосиликатами

В.Д. Вострикова^{1,2}, Е.Ю. Бразовская¹

E-mail: vostrikova02@yandex.ru

¹Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» — Институт химии силикатов им. И.В. Гребеницкова, Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время наблюдается устойчивый рост потребления энергии. Основными источниками топлива остаются нефтепродукты, однако их использование сопровождается экологическими проблемами, так как сжигание приводит к выбросам углекислого газа и других загрязняющих веществ. В условиях быстрого истощения месторождений с легко извлекаемыми запасами нефти особую актуальность приобретает применение методов повышения нефтеотдачи. Исследования показали, что углекислый газ может использоваться в качестве агента для повышения нефтеотдачи, при этом его закачка в пласт одновременно решает задачи сбора и утилизации CO₂ [1]. Среди различных методов очистки газов от диоксида углерода наиболее эффективным является адсорбция, которая позволяет концентрировать CO₂ для его последующего извлечения и использования [2]. В качестве адсорбентов применяются твердые материалы с развитой внутренней поверхностью, представленные в виде гранул (шарики, таблетки, цилиндры и т.д.), мембран или в форме тонкоизмельченных частиц.

Цель данной работы — выбор эффективного сорбента для концентрирования CO₂ среди пористых алюмосиликатов различных структур. Для проведения исследования были выбраны следующие алюмосиликаты: монтмориллонит (ММТ), галлуазит (сферы) (NaI_{сф}), галлуазит (трубки) (NaI_{тр}), а также цеолиты Rho, Beta, Beta-B и Pau.

На основании проведенных исследований можно заключить, что наиболее эффективным адсорбентом CO₂ среди выбранных алюмосиликатов является цеолит Rho. Этот материал характеризуется большим объемом пор и малым диаметром входных окон, что обеспечивает надежное удержание адсорбированных молекул даже при высоком уровне заполнения пор.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №24-79-00040).

1. Шпуров, И.В. Задачи ГКЗ в условиях энергоперехода и низкоуглеродной экономики // Материалы Всероссийского совещания «Проблемы геологии нефти и газа». Москва: ФГБУ «ВНИГНИ», 2021. 11 с.
2. Ахметова, В.Р. Улавливание и хранение диоксида углерода – проблемы и перспективы / В.Р. Ахметова, О.В. Смирнов // Башкирский химический журнал. – 2020. – Т. 27, №3. – С. 103 - 115.

Гидротермальное взаимодействие гидросиликатных нанотрубок состава $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ с растворами солей меди (II)

Э.Н. Гатина

E-mail: gatina.en@iscras.ru

филиал Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова, Санкт-Петербург, Россия

Целью данной работы являлось изучение процессов взаимодействия раствора солей меди (II) с гидросиликатными нанотрубками состава $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ в гидротермальных условиях при давлении 10 МПа и 50 МПа, тем самым выявить влияние температуры и давления на структуру синтезированной нанотрубки. Известно, что скручивание двойных слоев в наносвитки происходит за счет момента сил по средством внутренних напряжений, возникающих из-за несоответствия размеров тетраэдрической и октаэдрической сеток структуры хризотила¹. Концы наносвитков открыты, что дает возможность заполнять их внутренние каналы различными веществами. Используя гидротермальный метод синтеза можно получить нанотрубки с практически одинаковыми диаметрами и правильной цилиндрической формы. Ранее было установлено, что на взаимодействие нанотрубок с растворами оказывают влияние физико-химические свойства растворов того или иного металла и изменение свойств растворов с увеличением температуры².

В свете этого в рамках настоящей работы были предприняты попытки исследования процессов заполнения синтетических гидросиликатных нанотрубок со структурой хризотила состава $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ растворами хлорида и нитрата меди (II).

В работе была использована предложенная ранее и несколько модифицированная методика заполнения нанотрубок водными растворами³. Температуры, давления и продолжительность обработки нанотрубок растворами были следующими: $t = 220$ и 250 °С, давление – 10 МПа и 50 МПа, продолжительность – 2, 6, 24 ч. Физико-химическими методами анализа (РФА, ПЭМ) установлено, что взаимодействие трубчатой матрицы с растворами солей меди (II) не приводит к разрушению трубчатой структуры. При увеличении температуры и продолжительности обработки нанотрубчатой матрицы растет количество компонентов солевого раствора, локализовавшихся внутри нанотрубок и в межфибрильном пространстве. Полученные гидросиликаты магния в системе $MgO-SiO_2-H_2O$ (NaOH) представляют собой вытянутые наночастицы, преимущественно с пустым внутренним каналом и размерами: длина – 153 ± 91 нм, наружный – 36 ± 15 нм и внутренний диаметр – 8 ± 2 нм. Обработанные нанотрубки с хризотиловой структурой после взаимодействия с растворами солей меди (II) исследованы методом сканирующей электронной микроскопии и параметры их кристаллической структуры уточнены методом Ритвельда по программе RietveldToTensor⁴.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХС РАН при поддержке Минобрнауки России (тема № 1023032900322-9-1.4.3).

1. Pauling L. // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 1930. V. 16. P. 578-582.
2. Чивилихин С.А., Попов И.Ю., Гусаров В.В. // ДАН. 2007. Т. 412. № 2. С. 201-203.
3. Масленникова Т.П., Корыткова Э.Н., Кузнецова О.М., Пивоварова Л.Н. // Физика и химия стекла. 2016. Т. 42. № 3. С. 400-408.
4. Бубнова Р.С. Фирсова В.А., Волков С.Н., Филатов С.К. // Физика и химия стекла. 2018. Т. 44. № 1. 48-60.

Пути снижения диффузионного водорода при сварке порошковыми проволоками

В.Б. Грибанова, П.В. Мельников, В.В. Гежа

E-mail: npk3@crism.ru

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург, Россия

Порошковые проволоки малых диаметров на данный момент являются одним из самых популярных типов сварочных материалов. Популярность обусловлена высокими сварочно-технологическими свойствами в разных пространственных положениях. На ряде предприятий судостроительной отрасли процесс механизированной сварки в газах порошковыми проволоками занимает порядка 90% от всех процессов, за вычетом автоматической сварки под флюсом [1].

Содержание диффузионного водорода в наплавленном металле при сварке высокопрочных низколегированных сталей является важным фактором, влияющим на вероятность возникновения трещин в процессе изготовления конструкции и как следствие, определяющим технологию сварки в части выбора технологических мероприятий (температуры предварительного и сопутствующего подогрева, обеспечения замедленного охлаждения и т.д.).

Порошковая проволока представляет собой непрерывный электрод трубчатой конструкции с порошкообразным наполнителем (зачастую - в виде агломерированного флюса). Сложностью при разработке агломерированных флюсов является наличие в их составе жидкого стекла, представляющего собой коллоидный раствор, содержащий связанную воду. В случае использования в составе флюса ферросплавов и компонентов-раскислителей, прокатка при высоких температурах не применима. В общем случае данная особенность обуславливает более высокое содержание диффузионного водорода в наплавленном металле по сравнению с механической смесью компонентов, используемой в качестве наполнителя [2]. Если вопрос снижения содержания влаги в агломерированном наполнителе не решается, то это влечёт за собой ограничение применения проволоки для сварки высокопрочных сталей.

Существующие на сегодняшний день щелочные жидкие стекла промышленного производства, применяемые для изготовления электродов и флюсов, обладают повышенной гигроскопичностью после их дегидратации в процессе прокатки. Поэтому одним из путей для минимизации диффузионного водорода при сварке порошковыми проволоками является разработка специализированных жидких стекол для агломерации наполнителя, а также технологии их изготовления [3].

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» начат цикл исследований в области создания низкогигроскопичного стекла с низкой вязкостью, которое должно обеспечивать достаточные клеящие свойства и низкое содержание влаги в составе наполнителя порошковых проволок.

1. Griбанова V.B., Melnikov P.V., Gezha V.V. Ways of import substitution of powder wires in welding production // Proceedings of XIII International Conference NAVY AND SHIPBUILDING NOWADAYS NSN'2024 PROCEEDINGS Conference theme Construction materials. Strength and structural mechanics. ИКР «NP-PRINT». 2024. P. 198-201.
2. Грибанова В.Б., Мельников П.В., Грибков О.И., Лукьянова Н.А. Системы легирования современных порошковых проволок для механизированной сварки в защитных газах высокопрочных судостроительных сталей // Вопросы материаловедения. 2023. № 4(116). С. 179-186.
3. Гежа В.В., Могильников В.А., Гежа В.В. Экспресс-методика определения содержания диффузионного водорода в наплавленном металле // Вопросы материаловедения. 2022. №4(112). С.17-22.

Метод электрохимической оценки адсорбционной емкости углеродных материалов*Д.Е. Гринёва^{1,2}, А.А. Засыпкина¹, Р.М. Меншарпов¹, Д.Д. Спасов^{1,3}, Н.А. Иванова^{1,4}*E-mail: darya19092002@gmail.com¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия³Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, Россия⁴Национальный исследовательский университет «МФТИ», Москва, Россия

Широкое разнообразие структур, а следовательно, и свойств углеродных материалов, таких как высокая электропроводность, развитая поверхность и устойчивость позволяет обеспечивать стабильность функционирования различных устройств и систем, в том числе электрохимических источников тока, и в частности, топливных элементов (ТЭ) [1]. Для успешного применения углеродного материала в технологии электрохимических источников тока важно обладать точными данными об истинной удельной поверхности углеродных материалов, что позволит оценить их перспективность в качестве носителей катализаторов.

В литературе представлено несколько методов определения истинной удельной поверхности, например метод низкотемпературной адсорбции азота (БЭТ) и эталонной контактной порометрии. Однако данные методы не учитывают влияние микропор и псевдоемкостных процессов, протекающих на поверхности исследуемого образца, что приводит к заниженным значениям истинной удельной поверхности. Напротив, метод электрохимической оценки истинной удельной поверхности может дать более широкое представление об электрохимических свойствах углеродных материалов. Данный метод учитывает заряд двойнослойной области при превращении углеродных материалов в кислородсодержащие интермедиаты, а величина, количественно характеризующая эти процессы, называется адсорбционной емкостью ($C_{адс}$) [2].

Ранее предложена методика для определения адсорбционной емкости материалов [3], однако одной из ключевых задач остается уточнение области потенциалов для измерения максимального значения $C_{адс}$, что определит истинную удельную поверхность. Поэтому целью данной работы является определение диапазона потенциалов двойнослойной области для расчета максимальной величины адсорбционной емкости.

В настоящей работе выполнены исследования по определению диапазона потенциала для расчета $C_{адс}$ углеродной сажи в стеклянной трехэлектродной электрохимической ячейке в жидком электролите. Для этого регистрировали циклическую вольтамперограмму (ЦВА) в 0.5 М H_2SO_4 в диапазоне потенциалов от 0 до 1.2 В (относительно обратимого водородного электрода) при скорости развертки 100 мВ/с, после чего регистрировали серию ЦВА с шагом 0.1 В в аналогичных условиях. В результате работы был рассчитан заряд в анодной и катодной областях ЦВА. На основе рассчитанной разницы между полученными значениями (Δ) определен оптимальный (при $\Delta \sim 0$) диапазон потенциалов от 0.2 до 0.4 В, в котором рассчитанное по ЦВА значение адсорбционной емкости максимально. Также выявлена взаимосвязь этой величины с дисперсностью распределения наночастиц катализатора по поверхности углеродного материала.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Zasyapkina A. A. et al. Recent Advances in the Development of Nanocarbon-Based Electrocatalytic/Electrode Materials for Proton Exchange Membrane Fuel Cells: A Review // *Catalysts*. 2024. V. 14. № 5. P. 303.
2. Вольфкович Ю.М. и др. Измерение разными методами удельной поверхности углеродных материалов // *Электрохимия*. 2014. Т. 50. №11. С. 1222.
3. Bogdanovskaya V.A. et. al. Physico-Chemical Properties of Carbon Nanotubes as Supports for Cathode Catalysts of Fuel Cells. Surface Structure and Corrosion Resistance // *Physicochemical processes at the interfaces*. 2016. V. 52. № 1. P. 49.

Получение термопластичных лент препрега методом пропитки из суспензии

Д. Д. Дворянцев, И. В. Лишевич, А. С. Саргсян, Е. А. Шарко

E-mail: NPK11@crism.ru

Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Традиционные методы получения термопластичных лент имеют ряд недостатков. Например, растворная пропитка лент требует использование агрессивных растворителей (особенно в сочетании с суперконструкционными пластиками) и занимает определенное время для их удаления. Пропитка из расплава полимеров также накладывает ограничения в части вязкости расплава, так как для проникновения вглубь пучка волокон требуется создание высоких сдвиговых напряжений, приводящих к разрыву волокон. [1, 2]

Целью работы является получение тонких однонаправленных термопластичных лент препрега на основе углеродного низкомолекулярного волокна марки UMT42S-3K-EP, пропитанного водной суспензией стабилизированного полиэфирэфиркетона (РЕЕК).

Исследован гранулометрический состав исходных компонентов в виде мелкодисперсных порошков и их смесей методом РЭМ-микроскопии и РСМА-анализа.

На основании теории взаимодействия частиц на поверхности твердое вещество-жидкость, были приготовлены лабораторные образцы суспензий на основе полиэфирэфиркетона (РЕЕК), стабилизированного анион- и катионактивными поверхностно-активными веществами (ПАВ). [3]

Для реализации технологии пропитки из водной суспензии полимера был разработан и изготовлен узел пропитки УПС-5-60-2Л для модернизации линии пропитки из расплава ТМА-600. [2-5]

Полученные лабораторные образцы термопластичных препрегов исследованы методами СЭМ-микроскопии и РСМА-анализа, а также определено соотношение полимер-армирующий материал.

В работе показано, что применение ПАВ позволяет значительно снизить гидрофобность РЕЕК для его стабилизации в водном растворе. Концентрации катионактивного ПАВ с концентрацией до 2 масс% достаточно для смачиваемости поверхности РЕЕК. Разработанный узел пропитки в составе линии ТМА-600 позволяет реализовывать технологию получения тонких однонаправленных лент препрега с содержанием полимера в волокне до 46,8 %.

1. Мэттьюз Ф., Ролингс Р. Композиционные материалы. Механика и технология: Пер. с англ. М.: Техносфера. 2004. 408 с.
2. Кобычно И. А. Получение и применение новых многоуровневых термопластичных композиционных материалов с углеродными наночастицами: автореферат диссертации на соиск. уч. степ. канд. техн. наук: 2.6.5 / Кобычно И. А.; Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого. – СПб, 2022. – 20 с.
3. Кривошапкин П.В., Кривошапкина Е. Ф., Назарова Е. А., Сталюгин В. В. Основы коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. Учебное пособие // Университет ИТМО. СПб: 2019. – 138 с.
4. Но К.К.С., Shamsuddin S.R., Riaz S., Lamorinere S., Tran M.Q., Javaid A., Bismarck A. Пропитка суспензией как путь к производству однонаправленных термопластичных композитов, армированных углеродным волокном // *Plastics, Rubber and Composite*. –2011. – Vol.40. –P.100–107.
5. Vodermaier A.M., Kaerger J.C., Hinrichsen G. Производство высокоэффективных армированных волокнами термопластов методом водной порошковой пропитки // *Composites Manufacturing*. –1993 –Vol.4. –P.123–132.

Н.А.Дыбин¹, Т.В.Фарзиев¹, В.А.Марков^{1,2}

E-mail: dybin.na@edu.spbstu.ru

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

²Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова филиал НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Твердотельные серебро-ионные эмиттеры – активно развивающийся класс устройств, на основе ионных электролитов с подвижными катионами серебра. Такие устройства могут применяться в качестве ионов в ионно-лучевых установках для обработки материалов и в качестве двигательной установки для сверхмалых аппаратов формата CubeSat [1].

Для исследования были рассмотрены две стеклообразные системы Ag₂O-Al₂O₃-P₂O₅ и Ag₂O-Al₂O₃-SiO₂-P₂O₅, с подвижными катионами серебра. Ранее данные электролиты изучались авторами в статьях [2] и [3] соответственно, а именно влияние Al₂O₃ на свойства стеклообразной системы. Удельная ионная проводимость образца 30Ag₂O-10Al₂O₃-60P₂O₅ составила 0,2·10⁻⁵ См·см⁻¹ при 200°С, а образца 25Ag₂O-5Al₂O₃-55P₂O₅-15SiO₂ 3·10⁻³ См·см⁻¹ при 300°С. Нами же была выдвинута гипотеза о том, что оксид кремния увеличивает удельную ионную проводимость системы Ag₂O-Al₂O₃-SiO₂-P₂O₅.

Целью работы являлось изучение влияний SiO₂ на свойства ионной проводимости и строение ближнего порядка стеклообразной системы Ag₂O-Al₂O₃-SiO₂-P₂O₅.

Для исследования были подготовлены образцы состава 30Ag₂O-10Al₂O₃-(60-x)P₂O₅-xSiO₂, где x = 0, 5, 10, 15 мольных процентов (далее xSiO)₂. С помощью рентгенофазного анализа подтверждена рентгеноаморфность полученных образцов.

По результатам дифференциального термического анализа было установлено, что при увеличении содержания оксида кремния возрастает температура стеклования, что косвенно может подтверждать рост стеклообразующей способности. У образцов 0SiO₂ и 15SiO₂ температура стеклования составила 472,15К и 534,15К соответственно.

С помощью импедансной спектроскопии были определены удельные энергии активации, наличие преимущественно ионной проводимости в образцах, а также ее увеличение с повышением содержания оксида кремния. Образец 0SiO₂ обладает энергией активации 0,61 эВ, а образец 15 SiO₂ – 0,52 эВ. Удельная ионная проводимость 0SiO₂ составила 1,06·10⁻⁵ См·см⁻¹, а 15SiO₂ – 5,04·10⁻⁵ См·см⁻¹.

По результатам комбинационной спектроскопии можно утверждать, что образуются связи Si-O-Al, P-O-Al, Si-O-P и увеличивается связанность фосфор- и кремнекислородных тетраэдров.

По итогу исследования влияния SiO₂ на свойства твердых электролитов в системе Ag₂O-Al₂O₃-SiO₂-P₂O₅ установлено, что увеличивается удельная ионная проводимость у образцов 0SiO₂ и 15SiO₂ она составила 1,06·10⁻⁵См·см⁻¹ и 5,04·10⁻⁵См·см⁻¹ соответственно, температура стеклования 472,15К и 534,15К соответственно, образуются новые связи Si-O-Al, P-O-Al, Si-O-P и увеличивается связанность фосфор- и кремнекислородных тетраэдров, что улучшает стеклообразующую способность.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-01232).

1. Толстогузов А [и др.]. Источники ионов на основе низкотемпературных ионных жидкостей для аэрокосмического применения, нанотехнологии и микрозондового анализа // Приборы и техника эксперимента, 2015, № 1, с. 5–20
2. Damrawi G. El, A.K. Hassan, A. Shahboub. Chemical durability and structure of Al₂O₃-Ag₂O-P₂O₅ glasses // Appl Phys A Mater Sci Process, 126, 2020, 1–7.
3. Daiko Y., K. Segawa, S. Honda, Y. Iwamoto. Ag⁺ ion emission from a sharp Ag₂O-Al₂O₃-P₂O₅-SiO₂ glass-fiber emitter // Solid State Ion, 322, 2018, 5–10.

Влияние размера и формы плоских образцов на определяемые кратковременные свойства пластичных и хрупких материалов

С.М. Ирмагамбетова¹, М.С. Тарасова¹, Б.А. Тарасов^{1,2}, Я.А. Леонов²

E-mail: irmagambetova97@mail.ru

¹*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

²*Акционерное общество "Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара", Москва, Россия*

Исследователей давно интересует возможность оценить механические свойства материала используя образцы небольшого размера [1-2]. На данный момент нет стандарта на микромасштабные испытания на одноосное растяжение, однако такие испытания потенциально могут предоставить данные, которые хорошо согласуются с макроповедением.

Использование миниатюрных образцов для испытания на растяжение имеет свои особенности и преимущества. Во-первых, благодаря их компактным размерам возможно проведение большего количества тестов с использованием меньшего количества материала, что является важным аспектом при работе с дорогостоящими или ограниченными ресурсами. Во-вторых, миниатюрные образцы можно испытывать быстрее, что позволяет повысить производительность лабораторных работ. Однако стоит отметить, что при использовании маленьких образцов необходимо учитывать возможное искажение результатов испытаний из-за более высокой чувствительности к внешним воздействиям и неоднородности в объеме материала.

Целью данной работы было изучить влияние размера и формы плоских образцов на определяемые кратковременные механические свойства материала.

Исследование проводилось на образцах из сталей марок 316 и 430, а также на образцах из вольфрама чистотой 99,8 %. С помощью электроэрозионного станка были получены образцы 5 видов (в том числе и образцы, изготовленные согласно ISO 6892-1:2019 [3] с рабочей длиной от 6 до 20 мм и шириной от 1,5 до 10 мм. В качестве захватов были использованы захваты типа ЗКШ для больших образцов, а также захваты с опорой на плечо для образцов меньшего размера. Испытания на одноосное растяжение были проведены при разных скоростях нагружения.

Из полученных данных были рассчитаны средние значения пределов прочности и текучести для каждого вида образца. При сравнении полученных значений механических свойств для пяти видов образцов, испытанных при одинаковых скоростях деформации, отклонение пределов прочности от значения стандартных образцов составило не более 5 %, пределов текучести – 15 %.

Геометрия образцов оказывает большое влияние на равномерное и полное удлинение. Отклонение значений равномерного удлинения образцов от значений для стандартных образцов составило не более 26 %, остаточного удлинения – не более 28% для сталей, однако отклонение значений остаточного удлинения для материала из вольфрама составило более 100%.

1. Kumara K. et al. Use of miniature tensile specimen for measurement of mechanical properties // Procedia Engineering, 2014. Vol. 86. P. 899 – 909.
2. Zhang L. et al. The development of miniature tensile specimens with non-standard aspect and slimmness ratios for rapid alloy prototyping processes // Journal of materials research and technology, 2021. Vol. 15. P. 1830-1843.
3. CEN EN ISO 6892-1-2019 Metallic materials - Tensile testing - Part 1: Method of test at room temperature (ISO 6892-1:2019) 04.12.2019

Эволюция микроструктуры и механических свойств стали X5ЮЗБСЧ при старении в течение 5000 ч

С.М. Ирмагамбетова¹, М.С. Тарасова¹, Б.А. Тарасов^{1,2}, Я.А. Леонов², П.С. Джумаев¹, Э.М. Глазовский¹

E-mail: irmagambetova97@mail.ru

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

²Акционерное общество "Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара", Москва, Россия

Сплавы Fe-Cr-Al являются кандидатными материалами для оболочек твэлов перспективных реакторов со свинцовым и свинцово-висмутовым теплоносителями, а также водо-водяных реакторов с водой со сверхкритическим давлением из-за присущей им стойкости к окислению в высокотемпературном паре и стойкости к коррозии в водной среде, низкой степени радиационного набухания, жаропрочности и т.д. [1-2].

Для получения конечного размера труб с толщиной стенки порядка 0,5 мм требуется многократная деформация и обжатие. Отжиг, необходимый для устранения внутренних напряжений также приведет к изменению микроструктуры трубы. Таким образом, большое значение имеет изучение влияния обработки отжигом на микроструктуру и механические свойства трубы. Также необходимо изучить эволюцию микроструктуры Fe-Cr-Al сплавов при длительном старении.

Целью данной работы было изучить влияние термической обработки на механические свойства труб из сплава на основе Fe-Cr-Al, а также изучение эволюции микроструктуры и механических свойств труб после термического старения при температурах 450, 550 и 650 °С в течение 100, 500, 1000, 2000 и 5000 ч.

В качестве исследуемого материала была выбрана сталь X5ЮЗБСЧ. Были получены тонкостенные трубы типоразмера 9,7x8,7 мм в холодно-деформированном, частично- и полностью рекристаллизованном состояниях.

При старении образцов из трубы в холоднодеформированном состоянии при температуре 450 °С в металле протекают, в первую очередь, процессы возврата деформированной структуры с образованием субзерен характерным размером 0,5 - 1,5 мкм. Увеличение температуры старения до 550, 650 и °С на базе 5000 ч приводит к протеканию не только процессов возврата, но и по данным СЭМ, к первичной рекристаллизации. Выделений дополнительных фаз или укрупнения исходных выделений фаз Лавеса не наблюдается.

Старение при температуре 450 °С в течение 5000 ч образцов труб в полностью рекристаллизованном состоянии, по данным ПЭМ приводит к выделению мелких преципитатов на дислокациях и малоугловых границах. Увеличение температуры старения до температуры 550 °С по данным ПЭМ приводит к тому, что вторичные фазы преимущественно выделяются уже на высокоугловых границах. Дальнейшее увеличение температуры старения до 650 °С приводит к тому, что преципитаты обособленно не выделяются, и происходит некоторое подрастание и выделений фаз Лавеса.

При этом, по результатам СЭМ каких-либо изменений структуры образцов труб в частично- и полностью рекристаллизованном состоянии после старения в течение 5000 ч при 550 и 650 °С не отмечается, что говорит о достаточной стабильности мезоструктуры.

Прочность и пластичность исследуемого сплава после отжига в течение 5000 ч оставались практически неизменными.

1. Wang P. et al. Effect of radiation damage and water radiolysis on corrosion of FeCrAl alloys in hydrogenated water // J. Nucl. Mater. Elsevier B.V, 2020. Vol. 533.
2. Kögler R. et al. Nanocavity formation and hardness increase by dual ion beam irradiation of oxide dispersion strengthened FeCrAl alloy // J. Nucl. Mater. 2012. Vol. 427, № 1–3. P. 133–139.

**Теплофизические свойства наножидкостей на основе воды,
модифицированных малослойным графеном**

Е.И. Калашикова¹, А.А. Возняковский¹, С.В. Кидалов¹, А.П. Возняковский²

E-mail: kalashnikatja@bk.ru

¹*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия*

²*Научно-исследовательский институт синтетического каучука имени академика С.В. Лебедева», Санкт-Петербург, Россия*

Развитие компактных и высокоэффективных устройств требует надежного теплового управления. Улучшение характеристик можно добиться созданием устойчивых суспензий наноматериалов в базовых жидкостях (т.н. наножидкостей, НЖ). Существующие НЖ на основе металлов и их оксидов имеют недостатки, такие как нестабильность частиц и риск повреждения систем [1]. Графеновые наноструктуры, обладающие высокой теплопроводностью, являются перспективными добавками, но их применение ограничено из-за сложности синтеза и высокой стоимости производства.

В нашей работе исследовались свойства (вязкость, теплопроводность, теплоемкость) НЖ на основе воды, модифицированные малослойным графеном (МГ), синтезированным из глюкозы в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза [2]. Данная методика позволяет синтезировать большие объемы материала (кг и более) без использования сложного оборудования. Для получения устойчивой суспензии в воде МГ подвергали ультразвуковой обработке в течение 30 минут при температуре 50 °С. Концентрация МГ в суспензии составляла 0,2, 0,4 и 0,8 масс. %.

Было установлено, что использование в качестве добавки МГ в концентрации 0,8 масс. % позволило достичь роста теплопроводности в 2,3 раза при температуре 60 °С по сравнению с исходной водой. Следует отметить, что отсутствуют значительные изменения вязкости и теплоемкости наножидкостей при различных концентрациях малослойного графена и температурах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №23-79-10254).

1. Gharagozloo P.E., Goodson K.E. Aggregate fractal dimensions and thermal conduction in nanofluids // J. Appl. Phys. 2010. V. 108. 074309.
2. Voznyakovskii A.P., Voznyakovskii A.A., Kidalov S.V. New way of synthesis of few-layer graphene nanosheets by the self propagating high-temperature synthesis method from biopolymers // Nanomaterials. 2022. V. 12. No. 4. P. 657.

Исследование кристаллической структуры бета-фазы оксида галлия методами электронной и рентгеновской дифракции

Д.А. Калганов^{1,2}, М.П. Щеглов², Е.Ю. Лобанова^{1,2}, Д.Ю. Панов¹, А.Е. Романов¹

E-mail: kalganov@itmo.ru

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Создание новых устройств силовой электроники и преобразователей энергии является важнейшим условием повышения энергоэффективности производства и поддержания экологического равновесия. В современных устройствах повышение эффективности обеспечивают технологии на основе широкозонных полупроводников, таких как карбид кремния и нитрид галлия. Использование сверхширокозонных полупроводников, таких как оксид галлия, нитрид алюминия и алмаз должно привести к следующему витку технологического развития благодаря их уникальным электрическим характеристикам и высокой температурной стабильности. Кроме того, предсказаны различные применения этих материалов в ультрафиолетовых [1] и рентгеновских детекторах [2]. Наличие методов получения монокристаллов бета-фазы оксида галлия (β -Ga₂O₃) из расплава [3] позволяет создавать объёмные элементы и подложки для гомоэпитаксии, что обеспечивает технологическое преимущество при использовании этого полупроводника [4].

Целью данной работы является оценка кристаллической структуры объёмного β -Ga₂O₃ при помощи дифракции быстрых электронов и рентгеновского излучения.

Исследованы образцы объёмного β -Ga₂O₃, полученного методом Степанова, выколотые в плоскостях спайности вдоль оси роста [010]. Часть образцов дополнительно отжигалась в кислородсодержащей атмосфере при температуре до $T = 1400$ °С. При помощи прецизионного трехкристалльного рентгеновского спектрометра были измерены брэгговские углы, рассчитаны величины полуширин кривых качания и межплоскостных расстояний, соответствующие различным порядкам дифракции на плоскости (100). Для оценки фазового состава использовались трёхмерные карты интенсивности дифракции быстрых электронов, составленные из отдельных картин дифракции, полученных при различных азимутальных углах как описано в [5].

Для исследованных образцов установлены изменения полуширин кривых качания $\text{FWHM} = 10 \div 16''$, и значений параметра $a = 12.2255 \div 12.2272$ Å в зависимости от условий получения и отжига. Анализ картин дифракции быстрых электронов позволяет говорить о низкой мозаичности и отсутствии фаз кроме оксида галлия, кристаллизовавшегося в пространственной группе $C2/m$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-12-00229, <https://rscf.ru/project/24-12-00229/>.

1. Kaur D., Kumar M. A strategic review on gallium oxide based deep-ultraviolet photodetectors: recent progress and future prospects // *Advanced optical materials*. 2021. V. 9. No. 9. P. 2002160.
2. Li Z., Tang H., Li Y., Gu M., Xu J., Chen L., Liu J., Ouyang X., Liu B. Enhanced scintillation performance of β -Ga₂O₃ single crystals by Al³⁺ doping and its physical mechanism // *Applied Physics Letters*. 2022. V. 121. No. 10. P. 102102
3. Bauman D. A., Panov D. I., Spiridonov V. A., Kremleva A. V., Romanov A. E. On the successful growth of bulk gallium oxide crystals by the EFG (Stepanov) method // *Functional Materials Letters*. 2023. V. 16. No. 7. P. 2340026.
4. Higashiwaki M., Wong M. H. Beta-Gallium Oxide Material and Device Technologies // *Annual Review of Materials Research*. 2024. V. 54. P. 175–198.
5. Suturin S. M., Korovin A. M., Fedorov V. V., Valkovsky G. A., Tabuchi M., Sokolov N. S. An advanced three-dimensional RHEED mapping approach to the diffraction study of Co/MnF₂/CaF₂/Si (001) epitaxial heterostructures // *Journal of Applied Crystallography*. 2016. V. 49. No. 5. P. 1532–1543.

Исследование внутреннего трения при низкотемпературном отжиге ультрамелкозернистого алюминия

Д.А. Калганов^{1, 2}, Д.И. Садыков¹, Т.С. Орлова¹

E-mail: kalganov@itmo.ru

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

²Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Сплавы на основе алюминия, благодаря их малому весу, высокой прочности и электропроводности, активно применяются и остаются перспективными для новых областей электроэнергетики [1], авиационного и автомобилестроения [2]. Внутреннее трение, соответствующее затуханию колебаний в материале на различных частотах, является одним из наиболее информативных структурозависимых свойств для таких материалов [3]. Особенности структуры металлических сплавов, обработанных интенсивной пластической деформацией, широко исследуются, в том числе, с помощью акустических (ультразвуковых) измерений [4]. Эти исследования при различных амплитудах колебаний и температурах позволяют определить влияние дефектной структуры на упругие и пластичные свойства материала.

В работе исследован технически чистый алюминий (Al 99.5 wt.%), в котором методом интенсивной пластической деформацией кручением (ИПДК) сформирована ультрамелкозернистая структура [5]. Обработка ИПДК проводилась при комнатной температуре с использованием прессы Walter Klement GmbH НРТ-07, давления 6 ГПа и 10 оборотов. В полученном материале степень истинной деформации составила $\epsilon \approx 6.6$ типичный размер зёрен ≈ 810 нм. Для последующих исследований методом испытаний на разрыв вырезались образцы стандартных форм. Исследования внутреннего трения проводили на образцах той же формы. При помощи составного пьезоэлектрического вибратора было определено затухание колебаний в диапазоне температур 110 К ÷ 473 К при скорости охлаждения и нагрева образца 2 К/мин.

Исходя из полученных данных абсолютная величина внутреннего трения в исследуемых образцах уменьшается после нагрева до 473 К. Также нагрев приводит к значительному уменьшению релаксационных процессов, связанных с взаимодействием дислокаций и максимумом на кривой внутреннего трения в диапазоне температур 180 ÷ 200 К.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00292, <https://rscf.ru/project/22-19-00292/>.

1. Murashkin M. Y., Sadykov D. I., Mavlyutov A. M., Magomedova D. K., Kazykhanov V. U. Strength, thermal resistance and electrical conductivity of aluminum-based composite wire // Journal of Physics: Conference Series. 2022. V. 2231. No. 1. P. 012005.
2. Sun T., Franciosa P., Sokolov M., Ceglarek D. Challenges and opportunities in laser welding of bxxx high strength aluminium extrusions in automotive battery tray construction // Procedia CIRP. 2020. V. 94. P. 565-570.
3. Mochugovskiy A. G., Mikhaylovskaya A. V., Zadorognyy M. Y., Golovin I. S. Effect of heat treatment on the grain size control, superplasticity, internal friction, and mechanical properties of zirconium-bearing aluminum-based alloy // Journal of Alloys and Compounds. 2021. V. 856. P. 157455.
4. Бетехтин В. И., Колобов Ю. Р., Нарыкова М. В., Кардашев Б. К., Голосов Е. В., Кадомцев А. Г. Механические свойства, плотность и дефектная структура субмикроструктурного титана ВТ1-0, полученного после интенсивной пластической деформации при винтовой и продольной прокатках // Журнал технической физики. 2011. Т. 81. №. 11. С. 58-63.
5. Мавлютов А. М., Латынина Т. А., Мурашкин М. Ю., Валиев Р. З., Орлова Т. С. Влияние отжига на микроструктуру и механические свойства ультрамелкозернистого технически чистого Al // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. №. 10. С. 1949-1955.

Исследование акустических свойств полидиметилсилоксана методом составного ультразвукового осциллятора

Д.А. Калганов^{1,2}, Е.В. Антонов¹, Л.М. Дорогин¹, А.Е. Романов¹

E-mail: kalganov@itmo.ru

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Материалы на основе полидиметилсилоксанов (ПДМС) обладают уникальными свойствами, включая температурную стабильность и химическую инертность, а также высокий коэффициент теплового расширения и большую, в сравнении с другими органическими соединениями, теплопроводность. Перечисленные свойства позволяют использовать композиционные материалы с матрицей из ПДМС в оптоакустических преобразователях [1, 2]. Исследование реологических и термофизических свойств имеет особенное значение для конструкционных и функциональных характеристик таких материалов [3, 4].

В работе исследованы образцы ПДМС на основе двухкомпонентной смеси Sylgard® 184 методом пьезоэлектрического осциллятора, аналогичным [5]. Процесс сшивки полимера исследован при температуре выдержки 150 °С. Процессы кристаллизации и стеклования ПДМС исследованы на образце в виде стержня в диапазоне температур $-140\text{ °C} \leq T \leq 30\text{ °C}$.

Температурная зависимость затухания колебаний в образце ПДМС при амплитуде деформации $\varepsilon = 10^{-6}$ описывает процессы кристаллизации $T_{кр} \approx -110\text{ °C}$ и стеклования $T_{ст} \approx -115\text{ °C}$. При исследовании сшивки полимера происходит изменение частоты колебаний, которая пропорциональна объёмному и упругому модулям. Зависимость соответствующей величины меняется при $t_1 \approx 3100\text{ с}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1349).

1. Гиршова Е. И., Микитчук Е. П., Белоновский А. В., Морозов К. М., Калитеевский М. А. Потенциал применения органических и металлополимерных материалов в оптоакустических генераторах ультразвука // Известия РАН. Серия физическая. 2022. Т. 86. № 7. С. 1001–1006.
2. Гиршова Е. И., Микитчук Е. П., Белоновский А. В., Морозов К. М., Иванов К. А. Оптоакустический генератор ультразвука на основе структуры с таммовским плазмоном и органическим активным слоем // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 7. С. 17–21.
3. Anisimov A. A., Zaytsev A. V., Ol'shevskaya V. A., Buzin M. I. Vasil'ev V. G. Boldyrev K. L., Shchegolikhina O. I., Kalinin V. N., Muzafarov A. M. Polydimethylsiloxanes with bulk end groups: Synthesis and properties // Mendeleev Communications. 2016. V. 26. No. 6. P. 524–526.
4. Vlassov S., Oras S., Antsov M., Sosnin I., Polyakov B., Shutka A., Krauchanka M. Y., Dorogin L. M. Adhesion and mechanical properties of PDMS-based materials probed with AFM: A review // Reviews on Advanced Materials Science. 2018. V. 56. No. 1. P. 62–78.
5. Bonifacich F. G., Lambri O. A., Landazábal J. P., Recarte V., Zelada G. I., Mocellini R. R., Alarcos V. S., Marenzana A., Plazaola F. Piezoelectric composite oscillator for measuring mechanical spectroscopy in small samples that non-match in half wavelength // Measurement Science and Technology. 2016. V. 27. No. 3. P. 035902.

Исследование коррозионной стойкости сварных соединений нержавеющей сталей, выполненных лазерной сваркой

А.Г. Карпова¹, В.В. Расков¹, И.Г. Карнов¹

Email: npk3@crism.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт»-ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

Технология лазерной сварки отличается от традиционных способов сварки химической чистотой сварной области, поскольку в процессе сплавления материалов не используются присадочные материалы или шлак, которые потенциально могут загрязнять рабочую среду.

В данной работе объектами исследования служили тавровые и стыковые сварные соединения нержавеющей сталей марок Х15Н9СЗБ1-Ш и 12Х18Н10Т, выполненные лазерной сваркой.

Для изготовления сварных образцов применялся иттербиевый волоконный лазер ЛС-10 максимальной мощностью 10000 Вт на $\lambda = 1070$ нм и роботизированный манипулятор FS 45N+ фирмы Kawasaki.

Целью работы являлась сравнительная оценка коррозионной стойкости сварных соединений в хлоридных растворах.

При проведении электрохимических измерений в 3,5% NaCl в течение 1000 часов при комнатной температуре показано, что потенциалы коррозии металла сварных соединений обеих сталей находятся в области от минус 0,04 до плюс 0,05 В (н.в.э.), характерной для нержавеющей сталей [1]. Данный эксперимент не позволил ранжировать сварные соединения сталей по коррозионной стойкости.

При исследовании стойкости к локальной коррозии в 10% растворе FeCl₃ · 6H₂O по ГОСТ 9.912-89 [2] в течение 24 часов при комнатной температуре установлено, что скорость питтинговой коррозии тавровых сварных соединений в 2 раза выше, чем стыковых сварных соединений для обеих марок сталей. При этом скорость питтинговой коррозии сварных соединений стали марки 10Х15Н9СЗБ1-Ш на ~10% ниже, чем у сварных соединений стали марки 12Х18Н10Т, несмотря на обратное соотношение величины показателя стойкости к питтинговой коррозии PRE (pitting resistance equivalent), $PRE_{12Х18Н10Т} = 17,9$ $PRE_{10Х15Н9СЗБ1-Ш} = 14,7$.

С целью объяснения полученных результатов выполнены металлографические исследования основного и переплавленного металла.

Показано, что более интенсивная локальная коррозия тавровых сварных соединений обусловлена образованием щелевых зазоров в местах непроваров и пузырей в переплавленном металле.

Причинами пониженной коррозионной стойкости сварных соединений стали 12Х18Н10Т по сравнению со сталью 10Х15Н9СЗБ1-Ш является повышенное количество сульфидов марганца и более выраженного карбидообразования в зоне термического влияния.

Исходя из вышеизложенного, можно сделать вывод о необходимости отработки технологии лазерной сварки тавровых соединений нержавеющей сталей.

1. Corrosion. ASM Handbook volume 13. - ASM International, 1992.

2. ГОСТ 9.912-89 Единая система защиты от коррозии и старения. Стали и сплавы коррозионностойкие. «Методы ускоренных испытаний на стойкость к питтинговой коррозии».

Исследование влияния ионизирующего излучения на структурные преобразования в волокнах полиакрилонитрила

О.Костерова^{1,2}, М.А. Маркова^{1,2}, А.В. Попугаев^{1,2}, А.В. Гусев³, Ж.Б. Лютова^{1,2}

E-mail: zhanna.lutova@gmail.com

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ ООО «Акцентр Групп», Московская обл., г. Дубна, Россия

Углеродное волокно (УВ) является одним из ключевых продуктов в современной химической промышленности и обладает практически неограниченными возможностями применения. Применение УВ в аэрокосмической отрасли, оборонной и автомобильной промышленности обусловлено высокими значениями прочности на разрыв (1,7 ГПа), модуля упругости (до 700 ГПа) и низкой, по сравнению с металлами, плотностью (1,7–1,9 кг/м³) [1]. В медицинской отрасли УВ используются для создания имплантатов, ортопедических изделий и других медицинских устройств. Их низкая плотность и высокая прочность делают их идеальным материалом для использования внутри организма, обеспечивая долговечность и безопасность при медицинских вмешательствах. Прекурсорами для получения УВ являются волокна вискозы, смола, полиакрилонитрил (ПАН), полиимид и полибензотиазол и другие полимеры. На сегодняшний день ПАН фактически является прекурсором примерно для 90% всех производимых углеродных волокон.

Радиационно-химическая модификация волокон ПАН может сократить периоды последовательных стадий производства УВ, улучшить потребительские свойства конечного продукта. [2]. Целью данной работы стало исследование влияния воздействия ускоренных электронов на химические, структурные и термические характеристики термопластичных ПАН-волокон.

Образцы промышленного ПАН-волокна предоставлены компанией «ЮМАТЕКС» (ГК «Росатом»), облучение дозами от 0,1 до 0,5 МГр проведено компанией «Акцентр Групп» (ГК «Росатом»).

Радиационно-химические преобразования в структуре волокон ПАН исследовались методами химического, термического и рентгеноструктурного анализов, УФ- и ИК-спектроскопии.

Было отмечено, что при воздействии дозы электронного облучения происходит трансформация нитрильных групп ($C\equiv N$) в группы типа $C=N$, что свидетельствует об инициации свободнорадикальных процессов и образованию циклических структур в цепях полимера. Незначительное изменение степени кристалличности, определенное по результатам рентгенофазового анализа, может происходить вследствие разрыва полимерной цепи или электронно-индуцированной дозозависимой стабилизации. Экспериментально была определена начальная температура циклизации. Так, для образца, облученного дозой 0,5 МГр, она составила 262 °С, в то время как процесс циклизации в необлученном образце начинался при 285 °С. Степень сшивки, вызванная электронно-лучевым воздействием, была определена по содержанию гель-фракции, нерастворимой в диметилсульфоксиде.

Проведенное исследование показывает перспективность применения электронно-лучевой обработки ПАН-волокна для оптимизации технологии производства углеродных волокон.

1. Peijs T., Kirschbaum R., Lemstra P. J. Chapter 5: A critical review of carbon fiber and related products from an industrial perspective // *Advanced Industrial and Engineering Polymer Research*. 2022. № 2 (5). С. 90–106.
2. Liu W. [и др.]. Radiation-induced crosslinking of polyacrylonitrile fibers and the subsequent regulative effect on the preoxidation process // *Radiation Physics and Chemistry*. 2012. № 6 (81).

Исследование формообразования на стадии микроинжекционного литья керамики

Д. Г. Крумин

E-mail: dmitry.krumin@icloud.com

Институт порошковой металлургии имени академика О.В. Романа, Минск, Беларусь

Технология инжекционного формования микрокомпонентов из оксидной керамики (microCIM) имеет большое преимущество перед другими методами их изготовления, особенно в сочетании с возможностями экономично производить прецизионные изделия сложной формы и высокой прочности [1]. Основными параметрами процесса на стадии формообразования являются давление и температура впрыска, а также расположение точек впрыска и температура литьевой формы [2]. Современные информационные технологии позволяют упростить и оптимизировать эти режимы с помощью их предварительного расчета в 3D-моделировании, а также избежать типичных ошибок при проектировании литформ, и, как следствие, в разы уменьшить количество бракованных изделий.

Необходимо также учитывать свойства исходных литьевых материалов (фидстоков) с максимальным содержанием основного оксида, размером исходных частиц порошка на микронном уровне, которые должны обеспечивать низкую вязкость и высокую текучесть, воспроизводимое поведение при заполнении полости литьевой формы и получение трехмерной гомогенной микроструктуры. Однородность сырья является критической характеристикой для более поздних стадий процесса. Неоднородности могут привести к разделению порошка и связующего, а также к дефектам, таким как пустоты, трещины, раковины, коробление, линии спайки.

Исследование формообразования на стадии заполнения литьевой формы проведено для фидстока Inmafeed K1013 с содержанием Al_2O_3 99,8 масс.% [3] Моделирование процесса осуществлялось в программе Autodesk Moldflow, которая обеспечивает углублённое моделирование самых современных технологических процессов инжекционного формования, предоставляя подробный анализ смоделированного процесса и интерпретацию полученных результатов, а также возможность наблюдать заполнение формы в режиме реального времени.

В результате численного моделирования эффективно спрогнозированы характеристики процесса, такие как давление и температура впрыска, поведение потока расплавленного фидстока, заполнение и охлаждение литьевой формы. Представлены рекомендации по разработке и заполнению литьевых форм для сложнопрофильных изделий, имеющих протяженные линии спаек с углом встречи потоков более 95° , по выбору точек впрыска и расчетах параметров инжекционного формования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект №Т23ИНДГ-009).

1. Ильющенко А.Ф., Барай С.Г., Крумин Д.Г. Получение керамики методом микроинжекционного формования: стадии и особенности разработки // Порошковая металлургия: респ. сб. науч. тр. 2024. №47 (в печати).
2. Ильющенко А.Ф., Барай С.Г., Крумин Д.Г. Моделирование процесса заполнения литьевой формы при инжекционном формовании сложнопрофильных керамических изделий // Порошковая металлургия, композиционные материалы, защитные покрытия, сварка: Материалы 16-й Междун. научно-техн. конференции (Минск, 22-24 мая 2024 г.). 2024. С. 243-247.
3. Product programme INMAFEED-Feedstocks // Проспект компании Inmatec (Германия). 2001. 2 с.

Исследование влияния программного нагружения на эксплуатационные характеристики жаропрочного никелевого сплава марки СЛЖС5-ВИ

В.В. Махорин, М.И. Оленин, д.т.н., доцент

E-mail: npk6@crism.ru

НИИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

Рабочая лопатка первой ступени турбины является наиболее нагруженным элементом газотурбинного двигателя (ГТД) [1], в том числе морского назначения. В то же время, повышение КПД газотурбинного двигателя напрямую связано с повышением температуры перед турбиной. Как следствие, одной из наиболее актуальных задач газотурбостроения является решение проблемы преждевременного выхода из строя рабочих лопаток газотурбинных двигателей за счет применения материалов с повышенной жаропрочностью.

Оптимизационные методы выбора химического состава [2], позволили предложить химический состав монокристаллического жаропрочного никелевого сплава марки СЛЖС5-ВИ, предназначенного для рабочих лопаток ГТД. Повышение сопротивления солевой коррозии осуществляется за счет введения хрома (до 12,7 %), который при большой концентрации приводит к значительному снижению характеристик жаропрочности.

Одним из методов повышения эксплуатационных характеристик является программное нагружение, положительное влияние которого на свойства различных материалов было показано в работе [3], однако применение программного нагружения для монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов ранее не осуществлялось.

Таким образом, целью данной работы является исследование влияния программного нагружения на характеристики жаропрочности сплава марки СЛЖС5-ВИ.

Для реализации способа программного нагружения (сжатия в процессе старения при высокой температуре, низких скорости деформации и сжимающем напряжении) были использованы оправки из стали марки 07X15H4M2T с коэффициентом линейного расширения меньшим, чем у сплава марки СЛЖС5-ВИ. Коэффициенты линейного расширения сплава марки СЛЖС5-ВИ и стали марки 07X15H4M2T в диапазоне температур от 20 °С до 900 °С определялись на dilatометре DIL 402 C. Консервативная оценка значений напряжений, возникающих в оправке и образце в ходе проведения программного нагружения, осуществлялась на dilatометре DIL 805 с деформационной системой. Испытания на разрыв проводились на универсальной испытательной машине Zwick/Roell Z050. Испытания на длительную прочность и ползучесть проводились испытательной машине АИМА-5-2. Исследования микроструктуры образцов сплава марки СЛЖС5-ВИ методами оптической и растровой электронной микроскопии, дендритов и междендритных участков, а также фрактографические исследования проводились на инвертированном оптическом микроскопе AxioObserver.3 и сканирующем металлографическом микроскопе «Tescan Vega» соответственно. Исследование локального рентгеноспектрального микроанализа элементного состава структурных составляющих сплава марки СЛЖС5-ВИ проводилось при помощи рентгеновского энергодисперсного спектрометра «INCA X-MaX-50».

По результатам проведенной работы установлено, что программное нагружение сплава марки СЛЖС5-ВИ позволяет обеспечить повышение доли вязкой составляющей в изломах, пластических характеристик при испытаниях на разрыв, жаропрочности и снижение скорости ползучести за счет растворения микропор и снижения дендритной ликвации.

1. Орлов М.Р. Технологическое обеспечение ресурса рабочих лопаток первых ступеней турбины авиационных и наземных газотурбинных двигателей: автореф. дис... канд. техн. наук (05.16.01) / Орлов Михаил Романович; Москва, 2009. – 47 с.
2. Данилов Д.В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе Часть – I / Д.В. Данилов, А.В. Логунов, Ю.Н. Шмотин // Технология металлов – 2014. – №5. – С. 3–10.
3. Гиндин И.А., Неклюдов И.М. Физика программного упрочнения. -Киев: Наук. Думка, 1979 – 184 с.

Влияние параметров микроплазменного напыления на структуру и свойства ВЭС-покрытий системы «5ме»

Е.Д. Нестерова¹, Т.И. Бобкова¹

E-mail: Nesterova@crism.ru

¹Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) активно изучаются уже более десяти лет и продолжают привлекать к себе внимание за счёт многообещающих особенностей структуры и свойств, таких как стабилизация фаз твердого раствора, замедленная диффузия и «коктейльный» эффект. Исследования показывают, что ВЭС превосходят обычные материалы при комнатной, высокой и криогенной температуре с точки зрения повышенной твердости, термической стабильности, прочности, вязкости разрушения, износостойкости, электрохимических и магнитных свойств. Потенциальное применение ВЭС обширное и, как правило, связано с экстремальными условиями эксплуатации технического оборудования в арктическом поясе, космическом пространстве, атомном реакторе и т.д. На сегодняшний день основное внимание сообщества ВЭС сосредоточено на поиске экономически выгодных и простых во внедрении на производство технологий, соответствующих по структуре и свойствам эксплуатационным требованиям.

Процесс микроплазменного напыления является одним из наиболее распространенных в промышленности методом нанесения толстых покрытий для агрессивных сред. С помощью высоких температур (10 000 – 15 000 К) и скорости плазменной струи возможно напылять практически любые порошковые материалы, восстанавливать геометрические размеры изделий любых размеров, практически избежать деформации материала подложки. Энергетические параметры плазменной струи и свойства получаемого покрытия, соответственно, можно регулировать в широких пределах подбором фракции и геометрии частиц напыляемого порошка, параметров дугового разряда, расходом газов и расходом порошка. Оборудование для плазменного напыления достаточно простое, а процесс легко механизуется и автоматизируется.

В настоящей работе представлено исследование влияния параметров микроплазменного напыления на микроструктуру и механические свойства покрытий на основе эквиатомной системы AlCoCrFeNi. В качестве исходного материала для напыления был использован механически синтезированный композиционный порошок системы AlNiCoFeCr, обладающий округлой формой частиц и гранулометрическим составом от 32 до 40 мкм [1]. Установлено, что формирование равномерного покрытия пористостью менее 3%, с интегральным значением микротвердости 600 HV, происходит при силе тока 30 А, расходе плазмообразующего газа 3 л/мин, расходе транспортирующего газа 3 л/мин и расходе порошка 20 % (от максимально возможного) [2].

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда, проект №21-73-30019.

1. Нестерова Е.Д. Разработка технологии синтеза композиционных порошковых материалов для формирования функциональных покрытий с целью повышения коррозионной стойкости и твердости приповерхностных слоёв судостроительной техники. - Сборник тезисов финалистов XXVI Конкурса бизнес-идей, научно-технических разработок и научно-исследовательских проектов под девизом «Молодые, дерзкие, перспективные» - СПб.: ИПЦ СЗИУ, 2024. – 26 с.
2. Nesterova E.D., Bobkova T.I. Formation of coatings with equiatom ratio from composite powders of the al-ni-co-fe-cr system // Abstracts of the V International Conference and School "Advanced High Entropy Materials", p.91, 2023.

Исследование термодинамической стабильности и магнитных свойств ферромагнитной фазы сплава тройной системы Mn-Al-Ga в зависимости от времени измельчения

К.С. Нечаев, Н.М. Вазинский, М.В. Горшенков, А.С. Фортуна

E-mail: kosta.neshaev@gmail.com

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия

Стремление человечества снизить антропогенный вклад в загрязнение окружающего мира способствует переходу на возобновляемые источники энергии. Так, увеличение производства ветроэлектрических установок и электрокаров приводит к росту потребления высокопроизводительных постоянных магнитов, подавляющая часть которых – магниты на основе редкоземельных материалов (РЗМ). Однако, РЗМ магниты ввиду многих недостатков, связанных с их производством и переработкой, требуют нахождения альтернативных материалов. В частности, производство РЗМ магнитов в России сильно зависит от импорта прекурсоров, поэтому данное направление исследований является крайне перспективным.

Так, в странах Евросоюза уже реализуется проект PASSENGER [1], который направлен на замену дорогостоящих РЗМ магнитов на Sr-ферриты и магниты системы Mn-Al-C там, где не предъявляются требований к миниатюризации. В частности, τ -фаза L1.0 (P4/mm) системы Mn-Al является перспективным магнитотвердым материалом за счет высокого значения поля анизотропии H_a (~ 5,7 Тл), определяющего возможное значение коэрцитивной силы H_c . Данный аспект, низкая стоимость компонентов и высокая распространенность месторождений элементов в мире делает применение магнитов Mn-Al выгодным с экономической точки зрения. Основным недостатком данной фазы является ее метастабильность. Однако, легирование сплавов MnAl небольшим количеством Ga [2] решает данную проблему, сохраняя высокий уровень магнитных свойств. Более того, повышение температуры Кюри является значимым преимуществом по сравнению с легированием С, что позволяет использовать магниты системы Mn-Al-Ga в большем рабочем диапазоне температур. Несмотря на высокий потенциал, на сегодняшний день нет работ, посвященных исследованиям структуры и магнитных свойств тройных сплавов Mn-Al-Ga полученных различными методами формирования высококоэрцитивного состояния, в том числе при измельчении сплава в планетарной шаровой мельнице. Поэтому, целью данной работы является исследование термодинамической стабильности и магнитных свойств ферромагнитной τ -фазы в условиях механического воздействия в планетарной шаровой мельнице и последующих отжигах.

По данным, полученным после каждой стадии измельчения и отжига были установлены закономерности изменения магнитных свойств и фазового состава образца, размера и формы частиц, параметров решетки и отношения c/a τ -фазы. Продемонстрирована высокая стабильность τ -фазы при выбранном режиме измельчения. Установлено, что «сухой» низкоэнергетический помол приводит к ингибированию процесса холодной сварки, что способствует формированию высокоанизотропных частиц чешуйчатой формы, чего ранее не наблюдалось. Выдвинуто предположение, что измельчение в течение более 3 часов приводит к изменению параметров решетки и степени тетрагональности за счет механического разупорядочения ферромагнитной фазы, приводящей к росту антиферромагнитного взаимодействия между атомами Mn и снижению значений максимальной I_{max} и остаточной I_r намагниченностей. Отжиг, снимая внутренние напряжения, и способствуя протеканию процесса химического перераспределения компонентов между фазами уменьшает вклад антиферромагнитного взаимодействия атомов Mn, что приводит к повышению значений I_{max} и I_r до близких к состоянию перед помолом, без значимого падения H_c .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 23-13-00161.

1. For sustainable and efficient RE-free magnets - PASSENGER URL: <https://passenger-project.eu/> (дата обращения: 04.10.2024);
2. Mix T. et al. Alloying with a few atomic percent of Ga makes MnAl thermodynamically stable //Acta Materialia. – 2017. – Т. 128. – С. 160-165.

Керамические реакционно-спеченные материалы на основе карбида кремния модифицированные тугоплавкими металлами

А.Н. Николаев

E-mail: nprk6@crism.ru

НИИЦ "Курчатовский институт" - ЦНИИ КМ "Прометей", Санкт-Петербург, Россия

Материалы системы «карбид кремния – тугоплавкий металл» являются перспективными для использования в высокотемпературных конструкциях, способных работать в защитной среде вплоть до температур 1400 °С.

Цель данной работы – исследование возможности получения композиционного керамического материала из системы SiC - Me (где Me – Mo, Hf, Ta) реакционным спеканием, за счет использования в качестве модифицирующей добавки металлического компонента на стадии формования. При этом применение металлической связки может открывать перспективы применения метода SLS.

В качестве исходных компонентов использовали смесь двух порошков: SiC «крупной» фракции 35-45 мкм и «мелкой» фракции 3-10 мкм (ГОСТ 3647-80) в соотношении 70/30, данный состав шихты позволяет достигнуть наиболее плотной упаковки, что было показано в работе [1, 2]. Помимо этого, в качестве модификаторов были использованы порошки молибдена фракцией 5-30 мкм, гафний 5-30 мкм, тантал 5-63 мкм, а также кусковой кремний (KP00) для обсыпки прессованных заготовок. В каждый состав добавляли 5 % мас. сажи (П-803). Шихтовые смеси перемешивали в барабанном смесителе в течение 4-5 часов, в качестве мелющих тел использовали корундовые шары. Тугоплавкие металлы вводились в составы в соотношениях от 10 до 50 % в счет общей массы. Смеси порошков пластифицировали при помощи водного раствора полиэтиленгликоля. Методом одноосного прессования формовали компактные образцы геометрических размеров 3,5×3,5×35 мм при давлении 100 МПа. Образцы сушили на воздухе в сушильном шкафу при температуре 80 °С в течение 1 часа, затем проводили спекание. Спрессованные заготовки спекали в высокотемпературной печи при температуре 1600 °С в вакууме, в течение 15 мин. Скорость нагрева печи составляла 300 град/час до достижения рабочей температуры, после выдержки образцы остывали с печью. Прессованные образцы для спекания помещались в графитовые контейнеры, покрытые нитридом бора, поверх насыпали кусковой кремний (избыток, что составляет порядка 80% от массы образцов) для реакционного спекания.

В работе показана возможность получения композитов SiC–Me, с различным содержанием модифицирующего компонента – молибдена, гафния и тантала (от 10 до 50 % масс.). Определена однородность структуры керамических материалов с применением расчетных методик анализа лакуарности и фрактальной размерности. Установлено, что введенные тугоплавкие металлы в условиях реакционного спекания полностью реагируют с расплавом кремния и переходят в устойчивую фазу MoSi₂, а также в фазы HfSi₂ и TaSi₂. Полученные композиты характеризуются плотностью порядка 3,02-3,50 г/см³ и прочностью при изгибе порядка 190-250 МПа.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-73-30019.

1. Беляков А. Н., Марков М. А., Перевислов С. Н., Быкова А. Д., Дюскина Д. А., Чекурьев А. Г., Каштанов А. Д. Исследование зависимости прочностных характеристик керамики на основе карбида кремния от исходного содержания углерода // Новые огнеупоры. 2023. № 11. С. 31-35.
2. Гаршин А. П., Вильк Ю.Н. Влияние некоторых технологических параметров на формирование структуры материалов на основе реакционно-спеченного карбида кремния // Огнеупоры и техническая керамика. 1996. № 8. С. 2–8.

**Электрофизические и структурные свойства мемристоров на основе
(CoFeB)_x(LiNbO₃)_{100-x} и (CoFe)_x(LiNbO₃)_{100-x}**

С.Н. Николаев¹, К.Ю. Черноглазов¹, Р.Г. Чумаков¹, Е.В. Храмов¹, В.В. Рыльков¹

E-mail: niklser@list.ru

¹Национальный исследовательский Центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В настоящее время наблюдается значительный интерес к изучению мемристивных структур типа металл-диэлектрик-металл (МДМ), демонстрирующих обратимые эффекты резистивного переключения (РП), в связи с перспективами их использования для создания элементов многоуровневой памяти и массивов мемристоров в матричном исполнении, имитирующих синапсы при построении нейроморфных вычислительных систем (НВС), нацеленных на решение задач искусственно интеллекта [1,2].

Эффекты РП в структурах МДМ обычно обусловлены процессами электромиграции вакансий кислорода (анионов) или катионов металлов [1,2]. В результате в диэлектрическом (оксидном) слое образуются (или разрушаются) нитевидные проводящие каналы (филаменты/мостики), а структура переключается соответственно в низкоомное или высокоомное состояния. Недавно нами были обнаружены и исследованы эффекты многоуровневого РП в структурах металл/нанокompозит/металл (М/НК/М) на основе НК (нанокompозита) (Co-Fe-B)_x(LiNbO_{3-y})_{100-x}. Высокая пластичность структур (более 256 состояний РП) позволила продемонстрировать высокую эффективность их использования в качестве биоподобных синапсов при реализации НВС [3,4].

В данной работе мы изучили влияние содержания бора на формирование вакансий кислорода в слое НК и характеристики РП.

Выполнены сравнительные исследования свойств мемристивных структур металл/нанокompозит/металл (М/НК/М) на базе НК, состоящих из матрицы LiNbO₃ и разных металлических гранул Co-Fe-B или CoFe. Структуры М/НК/М были получены с использованием ионно-лучевого распыления из составных мишеней Co₄₀Fe₄₀B₂₀-LiNbO₃ и Co₅₀Fe₅₀-LiNbO₃ на ситалловых подложках. Такие же слои НК были синтезированы на подложках из полиимида для исследования структурных особенностей методом спектроскопии тонкой структуры поглощения рентгеновских лучей (XAFS). Данные XAFS показывают идентичную кристаллическую структуру гранул в обоих типах НК, указывая на то, что значительная часть атомов бора при синтезе НК оказывается в изолирующей матрице, образуя оксид типа В₂О₃, что подтверждается данными рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. При этом в слоях не наблюдается металлического состояния ниобия.

Оба типа структур М/НК/М демонстрируют РП, однако, в случае НК с бором эффект РП проявляется значительно сильнее, что объясняется существенной ролью в РП вакансий кислорода, образованных при окислении бора.

Измерения спектров поглощения рентгеновских лучей выполнены с использованием оборудования УНУ «КИСИ».

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения № 075-15-2023-324.

1. Zahoor F., Azni Zulkifli T.Z., Khanday F.A. Resistive random access memory (RRAM): an overview of materials, switching mechanism, performance, multilevel cell (mlc) storage, modeling and applications // *Nanoscale Res. Lett.* 2020. V. 15. P. 90.
2. Huang W., Xia X., Zhu C. et al. Memristive artificial synapses for neuromorphic computing // *Nano-Micro Lett.* 2021. V. 13. P. 85.
3. Emelyanov A.V. et al. Self-adaptive STDP-based learning of a spiking neuron with nanocomposite memristive weights // *Nanotechnology.* 2020. V. 31. P. 045201.
4. Demin V.A. et al. Necessary conditions for STDP-based pattern recognition learning in a memristive spiking neural network // *Neural Networks.* 2021. V. 134. P. 64.

Ферментоподобная активность нанодисперсных неорганических материалов***К.Н.Новоселова^{1,2}, М.А. Попков¹, Е.Д. Шейченко^{1,2}, Г.С.Таран¹, А.Е. Баранчиков^{1,2}****E-mail: kpnovoselova@edu.hse.ru*¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т., 31, Москва, 119071*² *НИУ «Высшая школа экономики», Москва, ул. Мясницкая, 20, 101000*

Целью настоящей работы является выявление энзимоподобной (пероксидазоподобной) активности ряда неорганических наноматериалов (ZrO_2 , HfO_2) в модельных биохимических процессах (перекисное окисление органических соединений) с использованием взаимодополняющих методов анализа (хемилюминесценция). Актуальность проекта продиктована непрерывно растущим интересом российских и зарубежных производителей к созданию наноматериалов на основе неорганических соединений для биомедицинского применения. Выбранное направление развития обусловлено возможностью применения подобных материалов для создания новых лекарственных и косметико-терапевтических препаратов, в том числе средств адресной доставки лекарственных препаратов, УФ-протекторных кремов, средств противовирусной и антибактериальной терапии, за счет повышенной стабильности неорганических композиций в биологической среде.

Нанокристаллические оксиды циркония и гафния являются известными биосовместимыми и нетоксичными носителями лекарственных средств. Материалы на основе HfO_2 хорошо поглощают рентгеновское и гамма-излучение, что открывает возможности их применения в качестве радиосенсибилизаторов в ядерной медицине [1, 2]. Оценка ферментоподобных свойств нанодисперсных ZrO_2 , HfO_2 важна в контексте изучения их влияния на организм и потенциального применения в препаратах для лучевой терапии. Большинство известных методов синтеза зольей ZrO_2 , HfO_2 не выгодны с точки зрения длительности протекания реакции, широкого распределения частиц по размерам, а также низкой стабильности полученных зольей.

В ходе работы был осуществлён синтез стабильных водных зольей нанокристаллических оксидов гафния и циркония путем гидротермальной обработки комплексов их лактатов с добавлением мочевины при температуре $180^\circ C$ в течение 2 суток. Пероксидазоподобная активность полученных зольей по отношению к пероксиду водорода была изучена хемилюминесцентным методом, с использованием люминола в качестве молекулы-зонда. Измерения проводили в условиях, приближенных к физиологическим. В результате синтеза образуется нанокристаллический HfO_2 в моноклинной сингонии. Полученный образец диоксида циркония также соответствует его моноклинной модификации. При промывке продуктов ГТ-синтеза водой образуются стабильные водные золи HfO_2 , ZrO_2 с ζ -потенциалом = - 29 мВ и радиусом частиц 17 нм и -25 мВ, 385 нм соответственно. Полученные золи обладают выраженной люминесценцией при облучении УФ-светом, а также пероксидазоподобной активностью.

Работа выполнена при поддержке Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» (№ 24-00-036).

1. Popova N. P. et al. Selective radiosensitizing effect of amorphous hafnia modified with organic quantum dots on normal and malignant cells // Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2021, V. 66, No. 6, P. 931-937.
2. Giacobbe J., Dunning D.N. New Developments in the Fabrication of Hafnium Control Rods // Nucl. Sci. Eng. 2017. V. 4. No. 3. P. 467.

Влияние соотношений $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{H}_2\text{O}/\text{Na}_2\text{O}$ на механические свойства геополимеров***К.В. Орлов, А.А. Алексеев, О.Ю. Голубева***

E-mail: orlovkirill2002@inbox.ru

Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИХС, Санкт-Петербург, Россия

Геополимеры являются неорганическими полимерными материалами, состоящими из сшитых тетраэдрических звеньев $[\text{AlO}_4]$ и $[\text{SiO}_4]$, образующих трехмерную сетчатую структуру. Геополимерные материалы получают в результате щелочной или кислотной активации техногенного или природного сырья (алюмосиликаты подгруппы каолинита, золы ТЭС, металлургические шлаки, красный шлам) [1]. Данные материалы характеризуются высокой прочностью, огнестойкостью, устойчивостью к воздействию агрессивных сред, долговечностью и устойчивостью к циклическому замораживанию и оттаиванию [2]. Процесс получения геополимеров не требует высоких температур обжига сырья и не сопровождается значительной эмиссией CO_2 . В настоящий момент ведутся исследования, направленные на разработку геополимерных материалов с заданными механическими и физико-химическими свойствами, которые смогут стать полноценной заменой портландцемента в таких значимых областях, как экологичное строительство с применением аддитивных технологий и иммобилизация токсичных и радиоактивных отходов.

Для синтеза геополимеров потенциально может быть использовано любое сырье с достаточным количеством реакционноспособных SiO_2 и Al_2O_3 . Наиболее изучаемым прекурсором для получения геополимеров является термоактивированный природный каолинит, химический состав и морфология частиц которого варьируется в широких пределах для различных месторождений. Для устойчивого получения геополимерных материалов с заданными механическими и реологическими свойствами необходимо детальное изучение физико-химических закономерностей синтеза геополимеров, а также выявление оптимальных молярных соотношений $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{H}_2\text{O}/\text{Na}_2\text{O}$, при которых достигаются высокие значения механических свойств. Целью данной работы являлось изучение влияния данных соотношений на механические свойства геополимеров, полученных на основе алюмосиликатов подгруппы каолинита с различной морфологией частиц: нанотрубчатого галлуазита, пластинчатых природного и синтетического каолинитов.

В результате исследований синтезированных геополимеров были установлены оптимальные соотношения $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{H}_2\text{O}/\text{Na}_2\text{O}$, при которых образцы характеризовались наибольшими значениями прочности на сжатие. Самая высокая прочность на сжатие (57 МПа) достигается при использовании галлуазита с соотношением $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{H}_2\text{O}/\text{Na}_2\text{O}$ равным: 2.9; 0.8 и 7.2 соответственно. При использовании природного (38 МПа) и синтетического (25 МПа) каолинитов данные имеют значения: 3.2; 0.9; 7.4 и 4.0; 1.3; 7.6 соответственно. Синтетический каолинит обладает наименьшей прочностью на сжатие, так как отличается более высоким соотношением ж/тв и морфологией частиц.

1. Zandifaez P., Nezhad A.A., Zhou H., Dias-da-Costa D. A systematic review on energy-efficient concrete: Indicators, performance metrics, strategies, and future trends // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2024. V. 194. P. 114306.
2. Dahanni H., Ventura A., Le Guen L., Dauvergne M., Orcesi A., Cremona C. Life cycle assessment of cement: Are existing data and models relevant to assess the cement industry's climate change mitigation strategies? A literature review // *Construction and Building Materials*. 2024. V. 411. P. 134415.

К.А. Парих^{1,2}, Ю.А. Аликина²

E-mail: ksusha.parikh@gmail.com

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИХС, Санкт-Петербург, Россия

Антибиотикорезистентность микроорганизмов на сегодняшний день представляет глобальную проблему. Недостаточный контроль за применением и утилизацией антибиотиков в медицинской практике и в сельском хозяйстве приводит к попаданию данных лекарств в стоки и впоследствии в водные объекты хозяйственно-питьевого назначения [1]. Внести вклад в решение данной проблемы возможно усовершенствованием методов очистки сточных вод путем подбора наиболее эффективных сорбентов. Такими сорбционными материалами могут являться силикаты группы смектита за счет своей слоистой структуры, наличия рН-зависимого заряда, а также активных центров различной природы.

В представляемой работе были исследованы синтетические алюмосиликаты со структурой монтмориллонита с различной степенью замещения магния на алюминий $\text{Na}_{2x}(\text{Al}_{2(1-x)}, \text{Mg}_{2x})\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ($0 < x \leq 1$), в качестве объектов сравнения были выбраны бентонитовая глина (месторождение 10-й Хутор, респ. Хакасия) и активированный уголь (марка DARCO®, Fluka, $M=12,01$ г/моль, ч.д.а.). Синтез алюмосиликатов осуществлялся в гидротермальных условиях. Прекурсором служил высушенный гель соответствующего состава [2]. Адсорбтивом в данном процессе является ципрофлоксацин – антибактериальный препарат группы фторхинолонов, широко используемый в медицинской практике. Полученные образцы были исследованы комплексом взаимодополняющих физико-химических методов исследования. Адсорбция водных растворов ципрофлоксацина с начальной концентрацией 0,3 г/л проводилась в течение 2 часов при постоянном перемешивании. Конечные концентрации измерялись с помощью УФ-спектроскопии поглощения (спектрофотометр LEKISS2109UV) по величине оптической плотности на длине волны 275 нм. В таблице представлены адсорбционные емкости исследуемых образцов.

По результатам проведенных исследований было установлено, что наиболее эффективным из всего изученного ряда адсорбентов оказался образец с максимальным содержанием Al_2O_3 (25 мас. %, $\text{Na}_{0,2}\text{Al}_{1,8}\text{Mg}_{0,2}\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$), его адсорбционная емкость составляет $(199,1 \pm 3,6)$ мг/г. Для активированного угля – $(106,2 \pm 2,6)$ мг/г, для бентонита – $(199,1 \pm 3,6)$ мг/г. Полученные величины сорбции антибиотика на различных образцах могут быть объяснены различием в значениях удельной поверхности, объемом пор, зарядом поверхности материала, а также наличием способности расширения межслоевого пространства у монтмориллонитов.

Синтетический алюмосиликат почти в 3 раза превосходит активированный уголь, а природный аналог – в 1,5 раза. По результатам термического и рентгенофазового анализа было выявлено, что $\text{Na}_{0,2}\text{Al}_{1,8}\text{Mg}_{0,2}\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ способен к регенерации при 650°C , что является большим преимуществом, поскольку это экономически и экологически целесообразно для долгого и качественного процесса адсорбции. Таким образом, данные исследования отражают перспективность разработки адсорбентов на основе синтетических алюмосиликатов со структурой монтмориллонита для удаления антибактериальных препаратов широкого спектра в сточных водах.

1. Carvalho, L.A. Progress in the implementation of resolution 3/10 on addressing water pollution to protect and restore water-related ecosystems // United Nations. 2021. V. 5. No. 1. P. 2-5.
2. Golubeva, O. Y., E. Y. Brazovskaya, Y. A. Alikina. Influence of the Preparation Method on the Physico-Chemical and Sorption Properties of Montmorillonite // Ceramics. 2023. V. 6. No. 1. P. 922-934.

Наноструктурированная биосенсорная система на основе пептидных биораспознающих элементов для обнаружения лактоферрина***А.С. Принцева¹, Е.Н. Марценюк¹, Н.О. Ситков¹, А.А. Рябко²***

E-mail: alya.printseva@inbox.ru

¹*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) (СПбГЭТУ «ЛЭТИ»), Санкт-Петербург, Россия*²*Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), Санкт Петербург, Россия*

Создание новых устройств для оперативной диагностики биологических маркеров заболеваний является одной из важнейших задач современной биомедицины. Подобная задача может быть решена при помощи биосенсорных систем на основе электрического импеданса, которые по сравнению с другими электрохимическими биосенсорами не требуют повышенного качества электродов. С целью повышения чувствительности отклика измеряемого сигнала в биосенсорных системах могут применяться наноструктурированные материалы [1], позволяющие также увеличить эффективную площадь поверхности для им мобилизации биораспознающих элементов. В частности, перспективным материалом для биосенсорики являются наностержни оксида цинка [2], которые обладают рядом преимуществ, одно из которых заключается в достаточно высокой удельной площади наностержней, что позволяет повысить плотность иммобилизации биоселективных компонентов на поверхности нанокристаллов. Кроме того, наноструктуры на основе оксида цинка обладают достаточной технологичностью и простотой синтеза, в частности с помощью низкотемпературного гидротермального метода, который был использован в данной работе. Образованные таким образом структуры формируют на поверхности электродов однородное по высоте и плотности покрытие из наностержней, что обеспечивает стабильность базисных характеристик биосенсорных электродных матриц.

В работе представлен миниатюрный биосенсор с массивом наностержней оксида цинка (ZnO), из которых сформировали равномерное покрытие из наностержней ZnO длиной ~1 мкм и диаметром не более 50 нм. Для иммобилизации пептидных распознавателей наностержни ZnO последовательно обрабатывали с помощью 3-аминопропилтриметоксисилана (АПТМС) и м-малеимидобензоил-N-гидроксисукцинимидного эфира (MBS). В качестве визуального контроля эффективности иммобилизации белка на наностержнях использовали метод связывания антител, меченных пероксидазой хрена. В результате проведенных испытаний на примере лактоферрина было обнаружено два режима работы биосенсора: для малых концентраций целевого белка (< 5 нг/мл) и концентраций в диапазоне от 5 нг/мл до 5 мкг/мл. При малых концентрациях ощутимое влияние на импеданс оказывает наноструктурированное покрытие между электродами. Во втором случае основной вклад в импеданс биосенсора вносит изменение емкости наноструктурированного слоя на поверхности электродов. Измерения проводились с помощью импедансметра Z500P (Elins, Россия) в диапазоне частот от 10 Гц до 500 кГц и амплитуде 20 мВ. Полученные структуры пригодны могут быть использованы не один раз, поскольку электроды с покрытием из ZnO легко очищаются. Разработанный биосенсор обладает перспективой для использования в системах предназначенных для быстрого и эффективного обнаружения молекулярных маркеров широкого спектра заболеваний.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79 01136).

1. Sitkov N. et al. Hybrid Impedimetric Biosensors for Express Protein Markers Detection //Micromachines. – 2024. – Т. 15. – №. 2. – С. 181.
2. Ryabko A. A. et al. Two-stage synthesis of structured microsystems based on zinc-oxide nanorods by ultrasonic spray pyrolysis and the low-temperature hydrothermal method //Semiconductors. 2020. V. 54. P. 1496–1502.

УДК: 548.73

Исследование влияния величины рН среды и состава полировальных композиций на образование посторонних фаз на поверхности X-среза ниобата лития

К.С. Пундиков¹, Р.Р. Фахртдинов¹, А.А. Мололкин¹, И.Г. Курганов¹, В. Е. Умылин²

E-mail: kkbhbr2010@yandex.ru

¹ Федеральное Государственное Бюджетное Учреждение Науки Институт Проблем Технологии Микроэлектроники и Особо Чистых Материалов Российской Академии Наук (ИПТМ РАН), Черноголовка, Россия

² Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС» (НИТУ МИСИС) Москва, Россия

Интегрально-оптическая схема на монокристаллах ниобата лития является ключевым элементом в производстве отечественных высокоточных волоконно-оптических гироскопических приборов, применяемых в гражданской и военной авиации, морской технике. Для дальнейшего развития интегральной оптики и акустоэлектроники необходимы слоистые структуры на базе монокристаллов ниобата лития LiNbO_3 . Создание слоистой структуры – это сложный технико-технологический процесс, состоящий из множества этапов. Наиболее важным является подготовка поверхности LiNbO_3 для диффузного сращивания (ДС). Одним из факторов, влияющим на поверхность для ДС, является химический травитель и рН его среды. Известно, что рН среды влияет на образование посторонних фаз [1] на обрабатываемой поверхности и соответственно влияет на качество получаемых слоистых структур.

Целью работы является исследование влияния величины рН и состава полировальных композиций на образование посторонних фаз (Nb_2O_5 и NbO_2) на поверхности X-среза ниобата лития. Результаты работы могут быть использованы для выбора оптимальных условий подготовки пластин перед ДС.

В настоящей работе применялся метод рентгеновской дифрактометрии на Bruker D8 DISCOVER с вращающимся медным анодом по двухкристальной схеме без монохроматора. Для исследования были выбраны 5 полировальных композиций, приготовленных на базе отечественной коммерчески доступной полировальной суспензии «ЛЕЙКСИЛ» PS-40/75 (LPS) с различными химически активными реагентами для коррекции рН.

В ходе исследования были сняты дифрактограммы, на которых наблюдаются два интенсивных пика с $2\theta = 34.89^\circ$ и 73.56° , соответствующих отражениям от плоскостей (110) и (220) X-среза LiNbO_3 для линии $\text{CuK}\alpha_1$, а также два пика с меньшей интенсивностью на углах $2\theta = 31.45^\circ$ и 65.52° , соответствующие аналогичным отражениям (110) и (220) для характеристической линии $\text{CuK}\beta_1$. Помимо данных пиков, соответствующих основной фазе – ниобату лития LiNbO_3 , наблюдаются также пять пиков, соответствующих посторонним фазам, из которых по литературным данным [2] два пика соответствуют отражениям от плоскостей (020) и (040) фазы Nb_2O_5 . Остальные три пика не соответствуют ни одной из фаз: NbO , Nb_2O , Nb_2O_5 . В ходе работы выявлено, что толщина фазы Nb_2O_5 зависит от химически активной составляющей и находится в диапазоне от 4 до 8 нм. Возможность образования такой фазы также подтверждается исследованиями [1]. Показано, что КОН является оптимальным химически активным реагентом (с $\text{pH} \geq 10$), при добавлении которого в полировальную суспензию толщина негативной фазы Nb_2O_5 минимальна.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Фонда содействия инновациям (договор 16ГУПКЭС18/91724).

Работы были выполнены на базе ЦКП ИПТМ РАН.

1. Zantye P.B., Kumar A., Sikder A.K. Chemical mechanical planarization for microelectronics applications // Material Sci. and Engineering. –2004. – R. 45. – P. 89–220
2. F. Laves, W. Petter, and H. Wulf. Die kristallstruktur von zeta- Nb_2O_5 . Naturwissenschaften, 1964, 51: P. 633–634.

**Фазовые превращения при высокотемпературном отжиге керамик
состава α -WC + W₂C*****К.Е. Сметанина¹, П.В. Андреев¹, Н.В. Исаева^{1,2}, Е.А. Ланцев¹***

E-mail: smetanina@nifti.unn.ru

¹Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия²Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, Россия

Ранее проведённые исследования показали, что в процессе электроимпульсного плазменного спекания (ЭИПС) порошков на основе карбида вольфрама (WC) происходит интенсивная диффузия углерода из элементов графитовой пресс-формы [1]. Это приводит к уменьшению содержания дефицитной по углероду фазы W₂C в поверхностных слоях керамик (толщиной 50-100 мкм) и её восстановления до целевой фазы α -WC. В настоящей работе предложена схема исследования явления диффузии углерода на примере плотных керамик.

Исходные керамики (8 образцов) были изготовлены ЭИПС порошка WC, полученного методом плазмохимического синтеза [2]. Спекание осуществлялось в графитовых пресс-формах на установке Dr. Sinter model SPS-625 (SPS Syntex, Япония). Предварительное уплотнение порошка в пресс-форме осуществлялось при комнатной температуре при нагрузке 70 МПа на гидравлическом прессе 10т (ТД Сорокин, Россия). Условия ЭИПС: атмосфера – вакуум (6 Па), нагрузка – 70 МПа, скорость нагрева – 50°C/мин, температура спекания – 1500°C. Образцы были полностью очищены от графитовой фольги. Механической шлифовкой с использованием алмазных дисков с верхней грани каждого образца был удалён слой толщиной около 500 мкм (чтобы заведомо убрать возникший в процессе ЭИПС неоднородный по фазовому составу слой). После этого грани были отполированы с помощью алмазных паст до шероховатости 1/0 мкм. Механическая шлифовка осуществлялась на станке Secotom 10 (Struers, Дания), а полировка – на станке AutoMet 250 (Buehler, Германия).

Отжиг керамик осуществлялся в электропечи «ЭСКВЭ-320 ГМ13» (АО «Термотехник-МЛ», Россия). Атмосфера: вакуум (около 10⁻⁴ Па); температура нагрева: 1750°C; время выдержки: 3 часа. Использовалась подложка из корунда (Al₂O₃). На верхнюю грань четырёх образцов помещалась графитовая шайба (также отполированная до шероховатости 1/0 мкм), ещё четыре образца нагревались без шайбы.

Рентгеновские дифракционные эксперименты были проведены на дифрактометре DX2700-BH (Naoyuan Instrument, Китай) в геометрии параллельного пучка (CuK α излучение).

В порошке WC содержалась только фаза α -WC. На верхних гранях керамик перед отжигом обнаружены две фазы: α -WC и W₂C. Содержание фазы W₂C составило около 10% масс. Появление фазы W₂C связано с наличием кислорода, адсорбированного на поверхности частиц порошка. На поверхности образцов, отжигаемых без графитовой шайбы, обнаружен только вольфрам. Вместе с тем, на поверхности образцов, отжигаемых с шайбой, обнаружены три зоны разного фазового состава: 1) α -WC, 2) α -WC + W₂C, 3) W.

Таким образом, в процессе высокотемпературного отжига керамик WC с графитовыми шайбами происходило три процесса: в области 1 преимущественно происходила диффузия углерода с графитовой шайбы с восстановлением фазы W₂C до α -WC, в области 2 происходило испарение углерода из α -WC с образованием (увеличением доли) W₂C, в области 3 испарение углерода приводило к диссоциации обеих карбидных фаз до вольфрама.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках гранта №22-73-10175.

1. Smetanina K.E. et al. Nonuniform distribution of crystalline phases and grain sizes in the surface layers of WC ceramics produced by spark plasma sintering // Coatings. 2023. V. 13. No. 6. P. 1051.
2. Исаева Н.В., Благовещенский Ю.В., Благовещенская Н.В., Мельник Ю.А., Самохин А.В., Алексеев Н.В., Астахов А.Г. // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2013. №3. С. 7–14.

**Разработка подходов к управлению проводимостью
полимерных комплексов никеля с редокс-активными лигандами**

Е.А. Смирнова

E-mail: esmirnova@mail.ioffe.ru

ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Интересными представителями полимерных металлокомплексов с редокс-активными лигандами являются полимеры на основе саленовых комплексов никеля. Простота модульного синтеза, хорошая устойчивость и возможность достижения высокого уровня электрофизических и электрохимических характеристик обеспечивают широкие возможности практического использования полимерных металлокомплексов poly-[Nisalen] [1,2,3]. Интересно, что несмотря на значительную длительность исследования данных систем, у ученых не сложилось единого мнения относительно целого ряда фундаментальных вопросов. Разброс в толщинах, морфологии, условиях тестирования приводит к значительному разбросу экспериментально определенных параметров транспорта заряда в poly-[Nisalen], часто для полимеров, полученных из одного и того же мономерного комплекса [1]. Проведенные ранее исследования электронной проводимости poly-[Nisalen] носят точечный характер и не позволяют однозначно определить параметры, влияющие на величины и стабильность параметров транспорта заряда.

Целью данной работы являлось сравнительное исследование зависимости проводимости полимерных комплексов никеля с саленовыми лигандами от структуры мономерного комплекса и природы электролитного растворителя, использованного для формирования и исследования полимера.

Для решения этой задачи были проведены электрохимические исследования 8 комплексов: NiSaltmen, NiCH₃Saltmen, NiCH₃OSaltmen, NiSalcn, NiCH₃Salcn, NiCH₃OSalcn, NiSalphen и NiSalphenCH₃, различающихся составом заместителей в ароматической и мостиковой частях лиганда, в трех электролитных растворителях (ацетонитрил, 1,2-дихлорэтан и пропиленкарбонат), различающихся вязкостью, полярностью и донорными свойствами.

Особенности электронного транспорта в пленках исследованы с помощью метода *in situ* измерения проводимости [3]. Обнаружено, что зависимости G–E для всех исследованных комплексов в ацетонитриле, 1,2-дихлорэтаноле и пропиленкарбонате имеют колоколообразную форму. Установлено, что по сравнению незамещенными, полимеры с CH₃- и CH₃O-заместителями характеризуются более широким окном электрической проводимости и переходят в проводящее состояние при более низком значении электродного потенциала. Замещенные полимеры продемонстрировали хорошую устойчивость параметров проводимости при перезаряде в растворах на основе ацетонитрила и 1,2-дихлорэтанола. Для остальных полимеров в ацетонитриле, 1,2-дихлорэтаноле, и всех полимеров в пропиленкарбонате хорошая стабильность наблюдалась при окислении до значений максимума проводимости. При окислении до малых значений проводимости все полимеры демонстрировали устойчивые кривые.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-73-01261).

1. Chepurnaya I.A. et al. Redox-conducting polymers based on metal-salen complexes for energy storage applications // Pure Appl. Chem. 2020. V. 92. №8. P. 1239–1258.
2. Freire C. et al. Metallo(salen) complexes as versatile building blocks for the fabrication of molecular materials and devices with tuned properties // Coord. Chem. Rev. 2019. V. 394. P. 104–134.
3. Смирнова Е.А., Чепурная И.А. Зависимость электрической проводимости никель-саленовых полимеров от напряжения затвор-исток в электрохимическом транзисторе // Письма ЖТФ. 2022. Т. 48. № 1. С. 12–15.

Высокомодульная алмазная керамика из модифицированных компонентов для поглощения энергии ударного воздействия

Е.С. Степичев, С.П. Богданов

E-mail: npk3@crism.ru

НИИЦ "Курчатовский институт" – ЦНИИ КМ "Прометей", Санкт-Петербург, Россия

Для приближенной оценки способности твердого тела поглощать энергию высокоскоростного нагружения (удара) были выведены критерии, рассчитываемые на основе его фундаментальных физико-механических свойств [1]. Большинство критериев прямо пропорционально модулю упругости E — макрохарактеристике материала, показывающей его уровень сопротивляемости обратимым деформациям при растяжении или сжатии. Для поликристаллического многофазного материала модуль упругости может варьироваться в зависимости от гранулометрического состава исходных порошков, количественного соотношения фаз и их распределения, пористости. Также известно, что модуль упругости композиции зависит от характера взаимодействия на границе матрицы и частиц [2].

Такие зависимости наблюдаются в керамических композитах общего фазового состава алмаз–карбид кремния–кремний, получаемых методом пропитки расплавом кремния пористых прессовок на основе алмаза [3]. Модуль упругости достигается для них 754-768 ГПа. Для увеличения значения модуля нами был применен способ модификации исходного алмазного порошка, заключающийся в формировании пироуглеродного покрытия на поверхности частиц в результате пиролиза пропан-бутановой смеси [4].

Исследование композитов алмаз–карбид кремния–кремний, изготовленных с применением модифицированного порошка алмаза (фракции 250/200, 50/40, 10/7 мкм), показало, что наибольший вклад в модуль упругости вносит самая крупная из использованных фракция алмаза. При наличии пиролитического слоя только на фракции 250/200 мкм в составе трехфракционной смеси удалось синтезировать композит с модулем упругости $E = 805$ ГПа. Таким образом, алмаз-карбид кремниевая керамика способна более эффективно поглощать энергию удара и может быть применена для изготовления защитных конструкций.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-30019).

1. Шевченко, В.Я. и др. Обзор критериев и методов оценки свойств керамических материалов, предназначенных для защиты от воздействия ударных нагрузок // Вопросы материаловедения. – 2024. – №. 1. – С. 127-139.
2. Тихонова, И.В. Оценка параметров структурной неоднородности гетерогенных материалов методами количественной металлографии : учеб. пособие / И.В. Тихонова, Ю.Е. Титова, И.С. Малофеев. – Тула : ТулГУ, 2023. – 116 с.
3. Bogdanov, S.P. Effect of Diamond Phase Dispersion on the Properties of Diamond-SiC-Si Composites / Sergey P. Bogdanov, Andrey S. Dolgin, Sergey N. Perevislov, Nikolay A. Khristyuk, Maxim M. Sychov // Ceramics. – 2023. – V. 6. – P. 1632–1649.
4. Степичев, Е.С. Компоненты типа «ядро–оболочка» для прочной композиционной керамики / Е.С. Степичев, С.П. Богданов, А.С. Долгин // Всероссийская конференция «XXIV Всероссийское совещание по неорганическим и органосиликатным покрытиям», посвященная 75-летию Института химии силикатов имени И.В. Гребенщикова : Сб. тезисов докладов. – Санкт-Петербург : Изд-во «ЛЕМА», 2023. – С. 93-94.

Влияние воздействия ионизирующего излучения на гидродинамические свойства растворов модифицированного фуллереном поливинилпирролидона

А.В. Титова^{1,2}, Д.В. Звягина^{1,2}, В.П. Седов², А.В. Арутюнян², А.В. Попугаев^{1,2}, А.А. Борисенкова^{1,2}
E-mail: anna.titova.v@mail.ru

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Поливинилпирролидон (ПВП) является одним из перспективных полимеров-носителей, используемых в качестве связующего вещества для создания лекарственных препаратов [1]. Особенность его строения заключается в наличии гидрофобной углеродной цепи, необходимой для стабилизации и предотвращения агрегации частиц в растворах, и гидрофильного пирролидонового фрагмента, обеспечивающего водорастворимость соединений на его основе и биосовместимость в организме человека. Так, был получен перспективный для направленной доставки лекарственных препаратов конъюгат на основе фуллерена C₆₀, фолиевой кислоты (ФК) и ПВП в качестве биосовместимого спейсера [2]. Использование препаратов в биологии и медицине предполагает их стерилизацию. Для этого может использоваться ионизирующее излучение (ИИ) в дозах до 25 кГр. Однако, воздействие ИИ на растворы полимеров может приводить к образованию нано- и макрогелей посредством внутри- и межмолекулярных сшивок, при этом существенно изменяются размеры частиц и их молекулярная масса [3].

В связи с наличием ограничений по размеру частиц, усваиваемых организмом, целью данной работы являлось исследование влияния ИИ на гидродинамические свойства водных растворов ПВП К30 и конъюгата с фуллерена C₆₀ с фолиевой кислотой и ПВП.

Относительную вязкость растворов ПВП К30 и конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ при температурах 25 и 37 °С до и после облучения ускоренными электронами (E = 5 МэВ) дозой 8 кГр определяли методом капиллярной вискозиметрии. Характеристическую вязкость, определенную с использованием линейных экстраполяций по Хаггинсу и Кремеру, использовали для оценки средневесовой молекулярной массы. Методом динамического рассеяния света (ДРС) определяли средний размер частиц (R_h). Дзета-потенциал ПВП и конъюгатов в водных растворах определяли методом ELS.

Было установлено, что концентрация перекрывания, характеристическая вязкость конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ значимо не отличаются от таковых для ПВП К30. Воздействие ИИ приводило к увеличению вязкости растворов конъюгата и чистого полимера. Характеристическая вязкость облученных растворов возрастала от 0,21 до 0,34 дл/г, средневесовая молекулярная масса возрастала от $\sim 47 \cdot 10^3$ до $\sim 13 \cdot 10^3$ г/моль. Было показано, что конъюгат ФК-ПВП-C₆₀ в водных растворах образует агрегаты со средними размерами около 20 и 75 нм, что существенно отличается от чистого ПВП, образующего в водных растворах частицы со средними размерами около 3 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-73-01085.

1. Kurakula M., Rao G. S. N. K. Pharmaceutical assessment of polyvinylpyrrolidone (PVP): As excipient from conventional to controlled delivery systems with a spotlight on COVID-19 inhibition // Journal of drug delivery science and technology. 2020. V. 60. P. 102046.
2. Borisenkova A. A. et al. Fullerene C₆₀ Conjugate with Folic Acid and Polyvinylpyrrolidone for Targeted Delivery to Tumor Cells // International Journal of Molecular Sciences. 2024. V. 25. No. 10. P. 5350.
3. Balogh T. S. et al. Synthesis of poly (N-vinyl pyrrolidone) (PVP) nanogels by gamma irradiation using different saturation atmospheres // Radiation Physics and Chemistry. 2022. V. 198. P. 110238.

Механические свойства полимерных изделий, наполненных малослойным графеном и изготовленных DLP методом 3D-печати в вертикальной ориентации

С.И. Титова^{1,2}, А.А. Возняковский¹

E-mail: sofia.titova@internet.ru

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время фотополимерная 3D-печать активно развивается, однако изделия из фотополимерных смол (ФС) обладают низкими механическими свойствами, из-за чего их применение довольно ограничено. Решением этой проблемы является добавление наполнителей в ФС и создание полимерных композиционных материалов [1].

Целью данной работы является изучение влияния модифицирующих добавок малослойного графена (МГ), полученного в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), и длительности постобработки УФ-светом на механические свойства изделий, изготовленных DLP методом 3D-печати.

В качестве наполнителя использовали МГ, полученный в условиях СВС из глюкозы и окислителя нитрата аммония в соотношении 1:1 [2], который измельчили в среднем до 0,3 мкм в барабанной мельнице. Модифицирование коммерческой ФС Anycubic Standard Resin прозрачного цвета проводили путем диспергирования наполнителя в нагретой до 50 °С ФС при постоянном перемешивании и УЗ-обработки (22 кГц) в течение 45 мин до получения стабильной суспензии для 3D-печати. Концентрация МГ составляла от 0,1 до 0,5 масс. %, что соответствовало от 0,19 до 0,95 об. %. Образцы изготавливали необходимых размеров для измерений на DLP-принтере Anycubic Photon Mono M5S (Китай) при следующих настройках 3D-печати: длина волны отверждения 405 нм, толщина слоя засветки 50 мкм, время засветки слоя 3,2 с, вертикальная ориентация изделий. Полученные образцы подвергали постобработке в УФ-камере (405 нм, мощность 60 Вт) в течение 10, 20, 40 и 60 мин. Измерения прочности на изгиб и модуля упругости методом изгиба проводили на гидравлическом прессе ПМ-МГ4 (РФ) по ГОСТ 4648-2014.

Результаты измерений показали, что без проведения постобработки изделий в УФ-камере наибольший прирост прочности на изгиб в 1,44 раза и модуля упругости в 1,33 раза наблюдается у композитов с концентрациями МГ 0,25 масс. % и 0,5 масс. % соответственно.

При проведении УФ-обработки наибольший прирост прочности на изгиб в 1,38 раза происходит течение 10 мин при концентрации МГ 0,25 масс. %; модуль упругости возрастает в 1,31 раза в течение 20 мин при МГ 0,25 масс. %. УФ-обработка в течение 60 мин повышает модуль упругости для исходного полимера в 4,1 раза, для композитов с концентрациями МГ 0,1, 0,25 и 0,5 масс. % модуль упругости возрастает соответственно в 3,47 раза, 4,97 раза и 2,49 раза. Увеличение концентрации МГ в полимерной матрице затрудняет УФ-обработку из-за поглощения УФ-света частицами МГ [1].

Введение модифицирующих добавок МГ повышает механические свойства полимерных изделий, напечатанных DLP-методом в вертикальной ориентации, из-за высоких прочностных свойств наполнителя [2]. Предполагается, что частицы МГ ориентируются в полимере поверхностью к столику [1]. Постобработка изделий УФ-светом способствует более полной степени полимеризации изделий и повышению их механических свойств.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект № 23-79-10254.

1. Lai C. Q., Markandan K., Luo B., Lam Y. C., Chung W. C., Chidambaram A. Viscoelastic and high strain rate response of anisotropic graphene-polymer nanocomposites fabricated with stereolithographic 3D printing // Additive Manufacturing. 2021. V. 37. ID 101721.
2. Voznyakovskii A., Vozniakovskii A., Kidalov S. New Way of Synthesis of Few-Layer Grapheme Nanosheets by the Self Propagating High-Temperature Synthesis Method from Biopolymers // Nanomaterials. 2022. V. 12. No 4. ID 657.

Получение нанопорошка Co_3O_4 и его использование в микроплоттерной печати миниатюрных планарных структур

Я. Р. Топалова¹, Н. П. Симоненко², Т. Л. Симоненко², Ф. Ю. Горобцов², Е. П. Симоненко²,
Н. Т. Кузнецов²

E-mail: yaratopalova@gmail.com

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

²Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия

Как известно, разработка подходов к синтезу оксидных наноматериалов с заданными микроструктурными и функциональными характеристиками на сегодняшний день остаётся актуальной задачей современного материаловедения. Так, одним из наиболее востребованных оксидов является Co_3O_4 , который в наноразмерном состоянии за счёт комплекса своих полезных свойств находит широкое применение в различных областях науки и техники. В частности, оксид кобальта является востребованным в качестве катализатора [1], применяется для борьбы с загрязнением воздуха, а также в очистке сточных вод от органических загрязнителей. Покрытия из Co_3O_4 используются в качестве поглотителей солнечного света и защитного слоя [2]. Тонкие пленки оксида кобальта широко изучались при изготовлении твердотельных газовых сенсоров и электродных материалов для литий-ионных аккумуляторов [3]. При этом свойства наноматериалов в значительной степени зависят от условий их синтеза [4]. Таким образом, целью данной работы было изучение процесса синтеза наноразмерного оксида кобальта (II, III) методом химического осаждения и его применение для формирования миниатюрных планарных структур с помощью аддитивных технологий.

В рамках проведённого исследования методом химического осаждения получен наноразмерный оксид Co_3O_4 , имеющий несколько уровней организации частиц – первичные частицы размером около 23 нм образуют нанолиты шириной 1,5-2 мкм, которые самоорганизуются в иерархические агломераты размером около 10 мкм. Результаты синхронного термического анализа промежуточного продукта (гидроксид кобальта) позволили определить оптимальный режим его дополнительной термообработки с целью формирования однофазного нанопорошка оксида кобальта (II, III). С использованием синтезированного оксида кобальта была разработана методика получения функциональных чернил, представляющих собой дисперсные системы на основе оксидных наночастиц и подходящих для применения в микроплоттерной печати оксидных покрытий. Показано, что метод микроплоттерной печати позволяет формировать миниатюрные планарные наноструктуры Co_3O_4 размером 100-300 мкм на поверхности Si-подложки, обеспечивая воспроизводимость их микроструктурных характеристик, что особенно важно при изготовлении полупроводниковых устройств (альтернативные источники энергии, газовые сенсоры, «умные» окна и т.п.).

1. Journal A., Basicapplied O. F. Effect of pH on Cobalt Oxide Nano Particles Prepared by Co-Precipitation Method // Australian Journal of Basic and Applied Sciences. 2014. № 19 (8). P. 243–247.
2. Kayani Z. N. Investigation of structural, optical and magnetic characteristics of Co_3O_4 thin films // Applied Physics A: Materials Science and Processing. 2019. № 3 (125). article number 196.
3. Victoria S. G., Ezhil Raj A. M., Ravidhas C. An insight in the structural, morphological, electrical and optical properties of spray pyrolysed Co_3O_4 thin films // Materials Chemistry and Physics. 2015. (162). P. 852–859
4. T. L. Simonenko, N. P. Simonenko, Ya. P. Topalova, Ph. Yu. Gorobtsov, E. P. Simonenko, and N. T. Kuznetsov. Synthesis of Nanoscale Co_3O_4 Spinel and Its Application to Form Miniature Planar Structures by Microplotter Printing // Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2022, Vol. 67, No. 12, pp. 1939–1947.

Титановые сплавы для энергетики

И.В. Третьяков, А.Д. Каиштанов, В.П. Леонов, И.А. Счастливая

E-mail: VLeonov@crism.ru

*Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей»
им. И.В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Представлены актуальные направления исследований и разработок титановых сплавов НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» в области атомной и тепловой энергетики. Титановые сплавы характеризуются особыми свойствами для их использования в ядерных энергетических установках: высокая кратковременная и длительная прочность, пластичность в воде и паре, в условиях реакторного облучения; коррозионно-механическая стойкость в морской воде; малая склонность к радиационному набуханию и высокий темп снижения наведенной радиоактивности.

В докладе представлены результаты анализа в выборе композиции нового титанового сплава, обеспечивающего требуемый уровень прочности 850-900 МПа при 20 °С, термическую стабильность и хорошую свариваемость, работающего в условиях нейтронного облучения. Влияние легирующих и примесных элементов титановых сплавов на ударную вязкость при флюенсе 1×10^{21} н/см². Кинетика снижения остаточной активности титановых сплавов в зависимости от химического состава для достижения уровня радиационной безопасности сплавов [1].

На основании исследований разработана серия перспективных теплостойких радиационно-стойких титановых сплавов, сплавов со специальными физическими свойствами, в том числе сплавы с высоким темпом снижения наведенной активности после нейтронного облучения, сплавы с высокой теплопроводностью для теплообменного атомного и теплового энергосилового оборудования [2].

В докладе представлены результаты разработки высокопрочных титановых сплавов и изготовленных из них штампованных заготовок для сверхдлинных рабочих лопаток $L_{\text{общ.}} = 1600$ мм с целенаправленным формированием микроструктуры, которые позволят снизить потери на выходной скорости и повысить КПД турбинных установок нового поколения атомных и тепловых энергоблоков.

1. Леонов В.П., Счастливая И.А., Рогожкин С.В., Никитин А.А. и др. Микроструктура титанового сплава Ti-5Al-4V-2Zr в исходном состоянии и после облучения ионами титана // Перспективные материалы, 2016, № 12, с. 5-15.
2. Счастливая И.А., Леонов В.П., Третьяков И.В., Аскинази А.Ю. Влияние состава титановых α -сплавов на теплопроводность // Вопросы материаловедения, 2020, № 4 (104), с. 79-87.

**Исследование влияния режима импульсной аргонодуговой наплавки
коррозионностойкого покрытия на структуру и свойства зоны сплавления
Cr-Mo-V стали при изготовлении оборудования АЭУ**

Г.Б. Фомин, И.А. Морозовская, к.т.н.

E-mail: npk6@crism.ru

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

При изготовлении оборудования для атомных энергетических установок (АЭУ) с водным теплоносителем одной из наиболее трудоемких операций является наплавка антикоррозионного покрытия (АКП) на внутреннюю поверхность корпусов из стали перлитного класса со стороны рабочей среды [1].

В целях оценки возможности применения перспективного, более производительного способа полуавтоматической импульсной аргонодуговой сварки (наплавки) плавящимся электродом-проволокой сплошного сечения в защитном газе взамен наплавки ручным дуговым способом покрытыми электродами был проведен комплекс сравнительных исследований (структуры и фазового состава, механических свойств) с традиционно применяющимися способами.

Приведены результаты исследований влияния режима наплавки на форму валика и величину проплавления, послойного химического состава металла наплавки и линии сплавления, а также микротвёрдости и микроструктуру зоны сплавления в исходном состоянии и после термической обработки на стали 15Х2МФА.

Показано, что ширина зоны повышенных значений микротвёрдости уменьшилась с 2 мм в исходном состоянии до 0,4 мм после термической обработки, а максимальное значение микротвёрдости снизилось с 450 до 270, что соответствует аналогичным значениям для наплавленных покрытий, выполненных автоматическим способом лентой под флюсом [2,3].

В работе обоснован выбор оптимального режима наплавки, а также показано, что импульсная аргонодуговая технология обеспечивает заданные требования к качеству наплавленного металла и зоны сплавления при выполнении наплавки в различных пространственных положениях при повышении производительности наплавочных работ.

1. Баландин Ю. Ф., Горынин И. В. и др. Конструкционные материалы АЭС / М.: Энергоатомиздат, 1984, 280 с.
2. М. Н. Тимофеев, И. А. Морозовская, С. Н. Галяткин, Н.И. Затоковенко / Исследование коррозионно-стойких наплавочных покрытий оборудования АЭУ, выполненных ленточным электродом дуговым и электрошлаковым способами // Вопросы материаловедения № 105, 2021 - с.94-106.
3. Горынин И.В., Карзов Г. П., Галяткин С. Н., Михалева Э. И., Морозовская И. А./ Антиккоррозионная наплавка. Опыт применения и пути совершенствования // Вопросы материаловедения № 42, 2005- с.129-143.

Особенности фазового и структурного состояния сплавов τ -MnAl, легированных ванадием

А.С. Фортуна, К.С. Нечаев, Н.М. Важинский, М.В. Горшенков

E-mail: fortuna.as@misis.ru

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия

Ферромагнитная τ -фаза в системе Mn-Al образуется при концентрациях марганца 51–59% (ат.) и имеет решётку L1.0 (пространственная группа P4/mmm). Атомы Mn в такой решётке занимают позиции 1(a) [000], а атомы Al (а также избыток атомов Mn)– 1(d) [$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$]. Данная фаза является метастабильной и образуется в результате закалки с последующим отжигом из области высокотемпературной ε -фазы (ГПУ) или охлаждением со скоростью ~ 10 K/c из той же области. Равновесной в области гомогенности τ -фазы является смесь фаз γ_2 (D8.10, R3m) и твёрдого раствора на основе β -Mn (A13, P4₁32).

Ванадий является перспективным легирующим элементом для сплавов τ -MnAl с точки зрения магнитных свойств и фазового состояния. Так Zhao et al. [1] высказали предположение, что использование легирующих элементов, имеющих меньшее количество электронов на 3d оболочке, чем Mn – например, V и Ti, - может привести к повышению намагниченности насыщения сплава за счёт замещения атомов Mn, занимающих позиции 1(d). Xiang et al. [2] показали, что в сплаве (Mn_{0,55}Al_{0,45})₉₇V₃ при быстрой закалке фиксируется однофазное состояние τ -фазы, в то время как для двойных сплавов τ -MnAl при аналогичных условиях характерно образование ε -фазы. Таким образом, использование ванадия, вероятно, сможет повысить характеристики сплава при упрощении процесса его производства. Поэтому сплавы τ -MnAl(V) требуют дальнейшего изучения, в частности установления закономерностей формирования фаз при различных концентрациях элементов, входящих в состав сплава, а также особенностей получаемой дефектной структуры, что являлось целью данной работы.

Исследование проводилось на массивных сплавах Mn_{55-x}Al_{45+x}V₃, x = 0, 2, 4, закалённых в воде и отожжённых, а также на быстрозакалённых лентах (x = 0, 2). Температуры фазовых переходов устанавливались методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) при скорости нагрева 10 K/мин. Фазовый состав и микроструктура изучались методами рентгеноструктурного анализа, растровой и просвечивающей электронной микроскопии.

В результате исследований массивных образцов было показано, что ванадий снижает термодинамическую стабильность τ -фазы, что проявляется в сужении области гомогенности, повышении критической скорости закалки, необходимой для фиксации фазы, а также в низкой температуре распада фазы. Ферромагнитная фаза образовывалась только в сплавах при x = 0, 2. При x = 0 её доля после закалки образца составляла 77,7% (по объёмной доле), проведение последующих отжигов приводило к уменьшению доли τ -фазы в сплаве. При x = 2 сплав после закалки имел структуру ε -фазы, которая путём проведения отжига при 500 °C превратилась в τ -фазу (91,6%) и малое количество (8,4%) (β -Mn), выделившегося по границам зёрен. Образовавшаяся τ -фаза содержала большое количество двойников.

Ленты состава Mn₅₃Al₄₄V₃ после быстрой закалки характеризовались наличием τ -фазы в количестве 87,9%, остальное (12,1%) – ε -фаза. Методом ДСК были установлены температура Кюри ферромагнитной фазы и температура распада этой фазы, которые составили 281 °C и 559 °C, соответственно. Таким образом, показано, что ванадий приводит к снижению температуры Кюри, так как в двойных сплавах она составляет ≈ 360 °C. Микроструктура фазы характеризуется наличием большого количества нанодвойников (ширина ламелей 4-10 нм).

1. Zhao S. et al. Evolution of Intrinsic Magnetic Properties in L10 Mn-Al Alloys Doped with Substitutional Atoms and Correlated Mechanism: Experimental and Theoretical Studies // Physical Review Applied . 2019. V. 11, 064008. P. 1-13.
2. Xiang Z. et al. Nanocrystalline MnAlV rare-earth-free Permanent Magnetic Alloys with Improved Magnetization and Thermal Stability // Intermetallics. 2020. V. 116, 106638. P. 1-6.

Возможности применения радиационной технологии для производства процессинговой добавки на основе тонкодисперсного порошка политетрафторэтилена

Р.Р. Хижняков^{1,2}, Г.А. Рымиш¹, А.В. Гусев³, Ж.Б. Лютова^{1,2}

E-mail: zhanna.lutova@gmail.com

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ ООО «Акцентр Групп», Московская обл., г. Дубна, Россия

Фторполимеры известны своими выдающимися свойствами, в том числе высокой химической стойкостью, термостойкостью и низкими коэффициентами трения. Среди фторполимеров особое место занимает политетрафторэтилен (ПТФЭ), на долю которого приходится около 70% мирового рынка фторполимеров. В дополнение к перечисленным выше характеристикам он также обладает превосходными электроизоляционными свойствами и высокой устойчивостью к большинству химических растворителей. ПТФЭ широко используется в химической промышленности, в электротехнике и электронике. Из-за очень низкого коэффициента трения (0,04 при скоростях скольжения не более 0,01 м/с) ПТФЭ используется для изготовления подшипников, шариковых и роликоподшипниковых деталей, а также опорных площадок подшипников скольжения в опорах со статическими и динамическими нагрузками. Поскольку ПТФЭ биоинертен и нетоксичен, он находит применение в медицине для изготовления различных имплантов [1]. Кроме самостоятельного использования ПТФЭ перспективно создание его композитов с другими материалами для придания им износостойкости, огнестойкости, скользящих и других полезных потребительских свойств.

Низкая поверхностная энергия и ограниченная химическая активность затрудняют смачивание высокомолекулярного ПТФЭ, что, в свою очередь, препятствует равномерному распределению модификатора в матрице композита. В работе [2] показано, что размер частиц порошка ПТФЭ влияет на триботехнические свойства композитов, при этом крупные частицы ПТФЭ, негативно влияющие на механические свойства композита, способствуют более интенсивному образованию передаточной пленки при трении. Так же известно, что ПТФЭ является радиационно-чувствительным материалом [3]. Таким образом, создание технологии получения тонкодисперсных порошков путем облучения ПТФЭ совместно с измельчением является актуальной промышленной задачей.

В данной работе на базе производственной компании «Акцентр Групп» (ГК «Росатом») подобран режим получения фракции микронизированного порошка политетрафторэтилена с использованием электронно-лучевой обработки, последующего измельчения на струйной вихревой мельнице, циклонного разделения и фильтрации. Размер частиц на всех стадиях эксперимента оценивался методом лазерной дифракционной спектроскопии (анализатор Bettersizer 2600 с приставкой для анализа в жидкой среде). Изменения в молекулярной структуре, вызванные радиолизом ПТФЭ оценивались методом ИК спектроскопии, термокинетические исследования полученных модифицированных порошков исследуемого материала проводились методами ТГА и ДСК.

1. Roina Y, Auber F, Hocquet D, Herlem G. ePTFE-based biomedical devices: An overview of surgical efficiency. *J Biomed Mater Res B Appl Biomater*. 2022 Feb;110(2):302-320.
2. Shelestova, V.A., Grakovich, P.N., Shilko, I.S. et al. The Tribotechnical Properties of Composites Based on Different Grades of Fluoroplastic-4 and Carbon Fibers. *J. Frict. Wear* 42, 75–79 (2021).
3. Saito, H., Furuta, M., Matsugaki, A. et al. Radiation-resistant properties of cross-linking PTFE for medical use. *Polym. Bull.* 76, 6111–6122 (2019).

Исследование структуры и механических свойств сварного соединения из сплава В95пчТ2, полученного методом СТП

Е. И. Циренникова, Н.Н. Барахтина, к. т. н. Е. А. Алифиренко

E-mail: npek@crism.ru

НИИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

Первоначально способ сварки трением с перемешиванием (СТП) разрабатывался для сварки термически неупрочняемых алюминиевых сплавов с целью решения проблем, связанных со сваркой плавлением, и получил широкое распространение во многих отраслях промышленности при сварке металлоконструкций из алюминиевых сплавов.

СТП позволяет формировать качественные сварные соединения полуфабрикатов из алюминиевых деформируемых сплавов, в том числе из высокопрочных термически упрочняемых сплавов – не свариваемых или ограниченно свариваемых обычной дуговой сваркой.

Благодаря широким технологическим возможностям, СТП начинают применять в авиа- и ракетостроении в качестве альтернативы заклепочным и механическим соединениям [1-2].

Одним из основных конструкционных материалов в современном авиа- и ракетостроении является высокопрочный термически упрочняемый сплав В95пч системы Al – Zn – Mg – Cu. Поэтому проблема получения прочных сварных соединений из сплавов системы Al – Zn – Mg – Cu с применением перспективного метода СТП является актуальной.

Опыт показал, что хотя термически упрочняемые высокопрочные алюминиевые сплавы и свариваются методом СТП, но СТП-соединения таких сплавов обладают пониженной механической прочностью. Обычно их предел прочности составляет (0,6–0,8) прочности основного металла (ОМ).

Одним из путей повышения прочностных характеристик сварных соединений из термически упрочняемых алюминиевых сплавов является проведение термической обработки соединений после сварки.

В работе представлены результаты исследований влияния термической обработки на структуру и свойства сварных соединений листов из высокопрочного алюминиевого сплава В95пчТ2, полученных способом подводной СТП.

Установлено, что дополнительная термическая обработка СТП соединений сплава В95пчТ2 по режиму естественного старения повышает твердость металла в ядре сварного шва до значений твердости ОМ, а после искусственного старения по двухступенчатому режиму твердость металла шва превышает твердость ОМ на 15-20 единиц. При этом значения твердости металла зоны термического влияния (ЗТВ) сварных соединений как после естественного старения, так и после искусственного старения остаются ниже значений твердости ОМ на 10 и 20 ед. соответственно.

Получено, что применение термической обработки по режиму естественного старения позволяет повысить коэффициент прочности СТП-соединений из сплава В95пчТ2 до значения $K=0,92$, а по режиму двухступенчатого искусственного старения до $K=0,87$.

Результаты исследований методами оптической и электронной микроскопии показали, что этот эффект связан с измельчением зеренной структуры зон СТП- соединения и выделением из пересыщенного твёрдого раствора мелкодисперсных частиц интерметаллидных фаз состава: $MgZn_2$, Al_2CuMg , $Al_3Mg_4Zn_3$.

1. Ищенко А. Я., Подбельников С. В., Покляцкий А. Г. Сварка трением с перемешиванием алюминиевых сплавов (обзор). Автоматическая сварка. 2007. №11. С. 32-38.
2. Покляцкий А. Г., Чайка А. А., Ключков И. Н., Яворская М. Р. Сварка трением с перемешиванием алюминиевых сплавов различных систем легирования. Автоматическая сварка. 2010. № 10.

Влияние пониженной температуры среды на коррозионную стойкость конструкционных сталей

Д.Н. Чайникова¹, С.Ю. Мушникова¹

Email: npk3@crism.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

Для изготовления современной арктической морской техники применяются конструкционные стали различных структурных классов [1,2], которые отличаются по сопротивляемости коррозионному воздействию морской воды: низколегированные и легированные стали склонны к общей коррозии, нержавеющие стали могут подвергаться локальной питтинговой коррозии. В связи с различием механизма коррозионных процессов (общей и локальной коррозии), влияние понижения температуры эксплуатации на коррозионную стойкость указанных материалов существенно отличаются.

Объектами исследования служили стали двух структурных классов: бейнитно-мартенситная и нержавеющая аустенитная. Были выбраны два метода испытаний: измерение электродного потенциала при абразивном воздействии на поверхность образцов и электрохимические исследования (снятие поляризационных кривых) в водном растворе 3,5 % NaCl при комнатной и пониженных до 0 °С температурах (моделирующих климатические условия эксплуатации в Арктике).

При исследовании абразивного воздействия на характер и величину смещения электродного потенциала в водном растворе 3,5 % NaCl при понижении температуры от +20 до +10 °С установлено, что потенциал бейнитно-мартенситной стали смещается в отрицательную сторону в меньшей степени, в то время как у нержавеющей аустенитной стали наблюдается более сильное смещение потенциала в отрицательную сторону.

При снятии анодных поляризационных кривых показано, что при понижении температуры от +20 до 0 °С для бейнитно-мартенситной стали величина плотности тока коррозии уменьшается ~ в 2 раза, для нержавеющей стали аустенитного класса в интервале температур от +22 до +16 °С изменение электрохимических характеристик выражено в меньшей степени: величина потенциала питтингообразования увеличивается на ~ на 40 мВ.

1. Хлусова Е.И., Сыч О.В., Орлов В.В. Хладостойкие стали. Структура, свойства, технологии // Физика металлов и металловедение. 2021. Т. 122. № 6. С. 621–657.
2. Николаев Г.И., Кузьмин Ю.Л., Лишевич И.В. и др. Разработка систем катодной защиты от коррозии корпусов атомных ледоколов и арктических морских сооружений // Вопросы материаловедения. 2021. № 3. С. 150–162.

Особенности лазерной сварки слоистых композиционных материалов «алюминий-сталь»

З.Е. Чижев, С.А. Зыков, Ю.Л. Бойченко

E-mail: npek@crism.ru

НИИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

В 80-х годах XX века в НИИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» начались работы по разработке композиционного материала «алюминий-сталь» для нужд судостроительной промышленности. Одним из краеугольных камней создания корпусов судов, отвечающих требованиям заказчика, являлось обеспечение надежного соединения стального корпуса с алюминиевой надстройкой. Результатом этого стало создание биметаллического материала марки КБМ-1, на основе низколегированной стали типа 10ХСНД и алюминиевого сплава марки 1561.

Принципиальной технологией сварки КБМ-1 является раздельная сварка разнородных материалов, при которой стальные элементы корпуса привариваются к стальному слою, входящему в состав композиционного материала, алюминиевые элементы надстройки - к алюминиевому слою соответствующими для них способами сварки плавлением. Важнейшим условием получения качественных сварных сталеалюминевых соединений является недопустимость образования хрупких интерметаллидов алюминий – железо на границе контакта разнородных сплавов [1]. Классические типы сварки, например дуговая не всегда позволяют выполнить данное условие ввиду большого количества тепла, вводимого в металл шва. Как следствие возникают сварочные напряжения и деформации. Решением данной проблемы может стать увеличение скорости сварки.

Альтернативой может стать способ лазерной сварки. Данный способ позволяет сваривать с высокой скоростью как алюминий, так и сталь, что позволит выполнять все процессы с большей производительностью, чем в дуговых методах [2].

В работе будут приведены результаты механических испытаний и металлографические исследования контактных поверхностей биметалла, которые позволят выявить оптимальные режимы сварки сталеалюминевых конструкций с биметаллическим переходником.

1. Павлова В.И.// Исследование процессов взаимодействия стали и алюминия и прочности их сцепления в слоистом материале под воздействием термического цикла сварки// Вопросы материаловедения. 1998. № 4(15). С. 12-29.
2. Григорьянц А.Г., Шиганов И.Н.// Лазерная сварка и технология: учебное пособие для вузов: [в 7 книгах]. Кн. 5. Лазерная сварка металлов. – 3-е изд., стер. 2021. С. 28-34

Синтез люминофоров типа $REMO_4$ с использованием микроволновых технологий

А.В. Чуркина¹, Е.В. Зеленина¹, О.Б. Щербина², М.Н. Палатников² И.В. Снятков¹

E-mail: aleksandrachurkina9@gmail.com

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева, Апатиты, Россия

Активированные редкоземельными металлами ортониобаты- ортотанталаты – это тугоплавкие материалы, обладающие химической стабильностью, ионной проводимостью, люминесцентными свойствами и фотоэлектронной активностью [1]. Эти материалы перспективны в качестве твердотельных люминофоров для создания источников белого света. Традиционная технология твердофазного синтеза таких люминофоров многостадийная, длительная и энергоемкая (прокаливание длится от 8 до 30 часов, проводятся многостадийные размолы, температура прокаливания 1300–1400°C), поэтому есть потребность в совершенствовании этой технологии [2].

В данной работе проведено исследование влияния микроволнового излучения на разных стадиях синтеза на морфологические и люминесцентные свойства керамик типа $REMO_4$, где $M = Nb, Ta$; $RE = Gd, Y, Er, Yb, Eu, Tb$. Время выдержки варьировалось от 5 до 15 минут, а температура выдержки составляла 1000 °C.

Спекание порошков с помощью СВЧ-излучения проводилось на разных стадиях синтеза, как для образцов, прошедших предварительный отжиг (прокаленных при 700–900°C), так и для «сырых» прекурсоров (полученных жидкофазным способом и высушенных при 70°C) [1]. В результате была получена плотная, фактически беспористая керамика с неявными границами зерен, что характерно для керамик, спеченных при помощи СВЧ.

Рентгенофазовый анализ синтезированных образцов показал, что образцы хорошо кристаллизованы, о чем свидетельствуют узкие и высокие пики на рентгенограммах. Основной фазой керамики является моноклинный β -фергусонит, но некоторые образцы содержат 5–6% кубической фазы.

Микроволновая постобработка многокомпонентных $(REE)Nb_xTa_{1-x}O_4$ составов способствовала увеличению интенсивности ИК и фотолюминесценции в несколько раз, придавая ранее не светящимся порошкам зеленое, желто-зеленое или огненно-красное свечение в зависимости от состава шихты.

Использование микроволнового излучения позволяет существенно сократить длительность термообработки и количество затрачиваемой энергии для синтеза составов на основе $REMO_4$, получая при этом уникальные морфологические и улучшенные люминесцентные свойства.

1. Palatnikov, M.N., Shcherbina, O.B., Masloboeva, S.M. et al. Sol–gel synthesis and structural and luminescent characteristics of a $Gd_{0.96}Eu_{0.01}Sm_{0.01}Tb_{0.01}Er_{0.01}Nb_{0.9}Ta_{0.1}O_4$ polycomponent solid solution. *J. Korean Ceram. Soc.* 60, 657–668 (2023). <https://doi.org/10.1007/s43207-023-00288-3>
2. Shcherbina, O., Smirnov, M., Zelenina, E. et al. Structural, mechanical, and luminescent characteristics of $Gd_{1-x}Eu_xNb_{1-y}Ta_yO_4$ ceramic solid solutions. *Appl. Phys. A* 130, 664 (2024). <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07822-y>

**Гибридный антифрикционный полимерный композиционный материал
для тяжело нагруженных узлов трения**

***Е. А. Шарко, А.В. Анисимов д.т.н., И. В. Лишевич, к. т. н., А. С. Саргсян к. т. н.,
И. В. Блышко, М. Ю. Соболев, Д. Д. Дворянцев***

E-mail: npk11@crism.ru

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время актуальной задачей является создание новых электроизоляционных антифрикционных материалов для высоконагруженных узлов трения судового машиностроения. Широко применяемые в настоящее время в судостроении антифрикционные углепластики имеют ряд ограничений на область применения в связи с наличием в составе проводящих углеродных волокон [1,2,3].

Для обеспечения требуемого уровня эксплуатационных характеристик современных узлов трения в НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» был разработан новый гибридный антифрикционный ПКМ, который обладает высокой прочностью и износостойкостью, низким коэффициентом трения, водостойкостью, и при этом не содержит углеродных волокон и является диэлектриком.

Разработанный антифрикционный ПКМ на основе гибридной армирующей ткани содержит в себе разные типы волокон. Органические волокна в составе ПКМ отвечают за функциональные свойства материала, такие как коэффициент трения и стойкость к изнашиванию, а неорганические волокна обеспечивают высокую механическую прочность.

На первом этапе работы были разработаны несколько опытных образцов ПКМ на основе разных гибридных тканей из стеклянных, арамидных, полиэтиленовых, фторопластовых и других нитей. В ходе лабораторных исследований были определены прочностные и триботехнические характеристики разработанных ПКМ. Установлено, что наибольшими прочностными показателями обладают ПКМ в чей состав входят стеклянные волокна (предел прочности при сжатии от 200 до 350 МПа). Гибридные ПКМ в чей состав входят волокна из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) обладают низким коэффициентом трения при контактном давлении 30 МПа ($f_c = 0,05$) и высокой стойкостью к изнашиванию (интенсивность изнашивания $I_h = 1,8$ мкм/км), что в два раза превышает показатели с углепластика марки «УГЭТ» ($I_h = 3,5$ мкм/км, $f_c = 0,12$).

Разработанный ПКМ на основе армирующей ткани из СВМПЭ волокон и стеклянных волокон и эпоксидного связующего получил название ПЭСТ. Данный материал прошел физические, физико-механические, электрические и климатические испытания, а также испытания по определению показателей пожарной опасности. В рамках проведения стендовых испытаний опытных образцов подшипников скольжения из разработанного материала в ЗАО «ЦНИИ СМ» подтвердилась работоспособность и надежность нового гибридного антифрикционного ПКМ ПЭСТ.

Работа выполнена в рамках государственного контракта шифр «Композит-подшипник».

1. Бахарева В. Е. Современные машиностроительные материалы. Неметаллические материалы. Справочник / Под ред. И. В. Горынина. – СПб.: НПО «Профессионал», 2014. – С. 79-133.
2. Николаев Г. И., Бахарева В. Е., Власов В. А., Лобынцева И. В., Анисимов А. В., Петрова Л. В., Симина В. Н. Применение антифрикционных углепластиков в подшипниках скольжения // Вопросы материаловедения. – 2006. – Т. 79, №5. С. 705-716.
3. Бахарева В. Е., Николаев Г. И., Анисимов А. В. Улучшение функциональных свойств антифрикционных полимерных композитов для узлов трения скольжения // Российский химический журнал. – 2009. – Т. 53, №4. – С. 4-18.

Фото- и электролюминесцентные свойства сополимеров флуорена и дикарбонитрильных производных фенантрена и стильбена

А.А. Якиманский¹, Е.В. Жукова¹, А.В. Кашина¹, Т.Г. Чулкова¹, Д.А. Лыпенко², А.В. Якиманский¹

E-mail: antonyyakimanskiy@yandex.ru

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИИЦ «Курчатовский институт» - Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Россия*

²*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина, Москва, Россия*

Сополифлуорены являются перспективными материалами для светоизлучающего слоя ОСИД и хемосенсоров благодаря своим люминесцентным характеристикам и хорошей химической и термической устойчивости [1, 2]. В основную цепь полимера можно включать фрагменты различные по своим электронным и транспортным свойствам для создания светоизлучающих материалов с необходимыми характеристиками. Дикарбонитрильные производные стильбена и фенантрена – хорошие кандидаты для этой роли, так как наличие сильного акцептора электронной плотности позволяет получить сополимер желаемой цветности и высокой яркости люминесценции.

Используя реакцию поликонденсации по Сузуки, мы получили серию сополимеров 9,9-диоктилфлуорена с 3,6-дибром-9,10-дикарбонитрилфенантrenom [3], 2,7-дибром-9,10-дикарбонитрилфенантrenom, 2,3-ди(3-бромфенил)фумародинитрилом и 2,3-ди(4-бромфенил)фумародинитрилом. Были изучены УФ-спектры поглощения, спектры фото- и электролюминесценции и другие характеристики полученных сополимеров. В результате, мы установили взаимосвязь между природой вводимых сомономеров и эффективностью переноса на них энергии возбуждения. Для одного из образцов достигнута высокая максимальная яркость электролюминесценции – более чем 9000 кд/м².

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 23-43-00060).

1. Yakimanskiy A.A., *et al.* Fluorene-based π -conjugated polymers for OLEDs: advances, opportunities, and challenges // *Mendelev Communications*. 2024. No. 34, P. 609–629.
2. Carbas B.B. Fluorene based electrochromic conjugated polymers: A review // *Polymer*. 2022. No. 254, P. 125040.
3. Yakimanskiy A.A., *et al.* Synthesis, Photo- and Electroluminescence of New Polyfluorene Copolymers Containing Dicyanostilbene and 9,10-Dicyanophenanthrene in the Main Chain // *Materials*. 2023. No. 16. P. 5592.

Ядерная медицина



Термический метод получения радиоизотопов, используемых в ядерной медицине

У.А. Барышникова, П.Л. Молканов, В.Н. Пантелеев

E-mail: ul.baryshnikova@mail.ru

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Уникальность методов ядерной медицины состоит в том, что они позволяют максимально эффективно и безопасно для человека диагностировать и лечить ряд онкологических, кардиологических, неврологических и других социально значимых заболеваний. Технологии ядерной медицины основаны на применении радиофармпрепаратов (РФП), в состав которых введены радионуклиды, получаемые на пучках заряженных частиц или нейтронов. Независимо от метода получения, целевые радионуклиды должны быть тем или иным способом выделены из облученного мишенного материала и из группы других радионуклидов, образующихся в различных реакциях в мишенном веществе. В настоящее время для этой цели используются, в основном, различные радиохимические методы, общим недостатками которых являются образование большого количества жидких радиоактивных отходов, а также трудоемкость и многостадийность технологического процесса, что приводит к потерям целевых радионуклидов. Именно поэтому актуальной является задача разработки новых высокоэффективных методов получения радиоизотопов, особенно на этапе выделения необходимых радиоизотопов из облученных мишеней.

Для получения долгоживущих (с периодами полураспада несколько и более часов) радиоизотопов, при условии отсутствия необходимости изотопного разделения, нами ранее был предложен метод термического (высокотемпературного) разделения в вакууме мишенного материала и образованных в нем целевых радионуклидов [1]. В данном методе используется различие в летучести, или, другими словами, в давлении насыщенных паров мишенного вещества и образованных в нем радионуклидов. Для разделения некоторых пар целевых радионуклидов и мишенных веществ данный метод обладает рядом важных преимуществ: высокий выход и радионуклидная чистота целевых продуктов, простота процедуры их выделения, отсутствие больших количеств радиоактивных отходов.

В наших предыдущих работах [1,2] термический метод был успешно использован для выделения некоторых медицинских радионуклидов (^{82}Sr , ^{67}Cu) из мишеней, облученных на протонных пучках различных энергий (от 100 до 1000 МэВ).

Главной задачей данной работы являлось подтверждение возможности использования метода термического разделения мишенного вещества и производимых в нем радионуклидов и для случая облучения мишенного вещества тепловыми нейтронами. Для этой цели были выбраны ^{177}Lu – радионуклид, используемый для лечения рака предстательной железы, и $^{99\text{m}}\text{Tc}$ – радионуклид, который в настоящее время наиболее широко используется для медицинской диагностики. В проведенных экспериментах для получения ^{177}Lu использовалось мишенное вещество в виде металлического иттербия, а для получения $^{99\text{m}}\text{Tc}$ использовалась окись молибдена MoO_3 .

Для исследования выделения целевых радионуклидов лютеция и технеция был использован специальный вакуумный стенд, в котором облученное мишенное вещество нагревалось до необходимой температуры разделения в условиях высокого вакуума.

1. Пантелеев В.Н. и др. Новый метод получения генераторного радионуклида Sr-82 и других медицинских радионуклидов // Журнал технической физики. 2018. Т. 88. № 9. С. 1296-1302.
2. Panteleev V.N. et al, Target development for ^{67}Cu , ^{82}Sr radionuclide production at the RIC-80 facility // Physics of Particles and Nuclei, 2018, Vol. 49, No. 1, P. 75–77.

Формирование базы данных по радиобиологическому ответу опухолей и нормальных тканей на основе клинических данных фотонной и нейтронной лучевой терапии

Е.А. Селихова¹, И.Р. Сагов^{1,2}, Е.С. Сухих^{1,3}

E-mail: eas76@tpu.ru, selihova_ekaterina@mail.ru

¹Национальный Исследовательский Томский Политехнический университет, Томск, Россия

²ГАУЗ ТО «МКМЦ «Медицинский город»

³НИИ онкологии Томского НИМЦ

Лучевая терапия является одним из эффективных методов лечения злокачественных опухолей, задачей которого является максимальное увеличение поглощенной дозы облучения для поражения раковых клеток при минимальном воздействии на окружающие здоровые органы и ткани. Ограничением по интенсивности и виду облучения является (радиобиологический эффект) ответная реакция организма в виде лучевых реакций и осложнений [1]. Вероятность возникновения и степень выраженности радиобиологических эффектов после ЛТ зависит от многих факторов, например, вид ионизирующего излучения, режим фракционирования, локализация и размер области облучения, индивидуальная радиочувствительность пациента, физиологические параметры пациента, сопутствующие заболевания и т.д.

Для прогнозирования радиобиологического ответа при дозиметрическом и радиобиологическом планировании, понимание и учет радиобиологических параметров, входящих в различные модели, является ключевым аспектом. Радиобиологические модели позволяют количественно оценить влияние облучения на опухоль и нормальные ткани, рассчитать поглощенную дозу, а также оценить биологический эффект облучения при различных режимах фракционирования [2]. Однако существует проблема недостаточной систематизации численных значений параметров моделей радиочувствительности и отсутствия поддержки опыта клинического применения в современных системах планирования.

В связи с этим формирование специализированной базы данных радиобиологических параметров для фотонной и нейтронной лучевой терапии представляет собой важную задачу, способствующую улучшению прогнозирования результатов лечения и оценки риска осложнений.

Цель данной работы – формирование базы данных радиобиологических параметров, основанной на анализе клинических данных по фотонной и нейтронной терапии.

Для реализации поставленной цели проанализировано более 100 научных исследований, содержащих расчеты радиобиологических параметров наиболее исследованных радиобиологических моделей. В ходе исследования были учтены различные режимы фракционирования, энергия источника излучения, вид ионизирующего излучения, методика лучевой терапии, величина и область облучаемого объема, физиологические параметры пациентов, сопутствующие заболевания, а также учтена информация о клинических исходах и осложнениях.

В рамках данного исследования разработана база данных радиобиологических параметров, которая является важным инструментом для прогнозирования результатов лечения и оценки рисков для критических органов, учитывая индивидуальные особенности пациентов. А также применение базы данных в практической лучевой терапии и клинических исследованиях, способствует оптимизации режимов фракционирования и снижению частоты осложнений.

Работа выполнена при поддержке программы Минобрнауки «Приоритет 2030».

1. Джойнер М.С., ван дер Когель О.Дж. Основы клинической радиобиологии: пер. с англ. // Москва: БИНОМ – Лаборатория знаний. 2013. С. 600.
2. Столбовой А.В., Залялов И.Ф. Радиобиологические модели и клиническая радиационная онкология // Онкология. Журнал им. П.А. Герцена. 2016. Т. 6. С. 88-96. doi: 10.17116/onkolog20165688-96.

Количественная оценка качества планирования облучения больных с метастазами в головной мозг

Ж.В. Солдатова, П.И. Блиганов, Т.А. Крылова, И.М. Лебеденко

E-mail: szv298@gmail.com

Российский онкологический научный центр им. Н.Н. Блохина МЗ РФ, Москва

Метастазирование в головной мозг является серьёзным осложнением течения опухолевого процесса, которое отмечается у 20–25% онкологических больных. Приблизительно в половине случаев заболеваний метастазы имеют множественный характер. Лучевая терапия, несмотря на многочисленные осложнения и сопутствующие лучевые реакции, занимает одно из главных мест в лечении злокачественных новообразований разных органов и тканей [1]. Повышение точности моделирования дозового покрытия опухолей в системе планирования лечения имеет не только высокую научную и практическую значимость, но и является актуальной задачей, решение которой позволит значительно повысить выживаемость пациентов.

Цель представленной работы состоит в том, чтобы выявить корреляцию между дозиметрическими характеристиками планов облучения и клиническими последствиями лучевой терапии. В настоящее время на базе имеющихся данных по более чем шестидесяти пациентов с метастазами в головной мозг проведён анализ индекса конформности Паддика и индекса гомогенности [2]. Также осуществлён литературный обзор как отечественных, так и зарубежных работ [3].

Предполагается, что данные показатели оказывают влияние на успешность лечения, которая характеризуется выживаемостью пациентов за пять лет и вероятностью рецидивов.

1. Лыкова Е.Н., Уразова К.А. Введение в планирование лучевой терапии пучками тормозных фотонов: Учеб. пособие — М.: ООП физического факультета МГУ, 2019 — с. 6-91
2. Лебеденко И.М., Быкова Ю.Б., Болдырева В.А., Михайлова А.В. Оценка распределения дозы в планируемом объеме с применением индекса гомогенности // «Медицинская физика». 2017. №1. С. 34-37
3. Taro Murai, Yuki Kasai et al. Fractionated Stereotactic Intensity-Modulated Radiotherapy for Large Brain Metastases: Comprehensive Analyses of Dose–Volume Predictors of Radiation-Induced Brain Necrosis // *Cancers* 2024, 16, 3327