



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

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



16–18 НОЯБРЯ
Open Science



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

IX Всероссийского молодежного научного форума
с международным участием
«Open Science 2022»

16–18 ноября 2022 г.
Гатчина

В данном выпуске представлены аннотации докладов IX Всероссийского молодежного научного форума с международным участием “Open Science 2022”, 16–18 ноября 2022 г., г. Гатчина.

Проведению форума оказал поддержку



Мероприятие проведено при финансовой поддержке Курчатовского геномного центра – ПИЯФ по Программе развития центров генетических исследований мирового уровня (Соглашение No. 075-15-2019-1663).

Сборник подготовили Г.Н. Ключников, Л.Г. Ваганян, С.С. Мохова, И.С. Рябоконт,
В. В. Абрамец

Примечание: материалы представлены в авторской редакции.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2022

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Ю.А. Дьякова – сопредседатель, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
С.В. Саранцева – сопредседатель, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
В.И. Максимов – заместитель председателей, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Р.А. Ниязов – секретарь, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Д.Н. Аристов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
С.А. Артамонов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
С.И. Воробьев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
В.В. Воронин, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
С.В. Григорьев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
В.А. Демин, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
В.Т. Ким, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
А.А. Кульминская, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
А.И. Курбаков, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
И.М. Лапина, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Н.В. Марченков, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
М.А. Матвеев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Е.Ю. Москалева, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
С.Н. Нарыжный, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
С.Н. Пчелина, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
К.М. Семенов-Тян-Шанский, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
А.В. Титов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
А.Ю. Черненко, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
М.Д. Фукс, НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)
К.А. Шабалин, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
А.В. Швецов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
О.П. Якорев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Н.Ю. Петрова – сопредседатель организационного комитета
С.А. Шека – сопредседатель организационного комитета
В.В. Абрамец – заместитель председателя организационного комитета
Р.А. Ниязов – заместитель председателя организационного комитета
Е.В. Калоева – секретарь организационного комитета
А.Н. Андреева, техническое обеспечение
Н.К. Буш, информационное обеспечение
Л.Г. Ваганян, техническое обеспечение
А.В. Дзенковский, техническое обеспечение
Р.А. Жеронкина, информационное обеспечение
Е.В. Зорина, техническое обеспечение
Г.Н. Ключников, техническое обеспечение
Я.И. Ковальская, техническое обеспечение
С.С. Мохова, техническое обеспечение
Д.С. Новосельцев, техническое обеспечение
А.А. Павельева, техническое обеспечение
И.Н. Плешанов, техническое обеспечение
И.С. Рябоконт, техническое обеспечение
А.М. Скороходова, техническое обеспечение
Е.С. Хайбулина, техническое обеспечение
С.В. Халяпин, техническое обеспечение

Пленарные и приглашенные доклады



Изучение новых распадов B_c^+ мезонов в эксперименте LHCb на Большом адронном коллайдере

Д. Ю. Перейма

НИИ «Курчатовский институт», г. Москва

УДК: 539.126.4

Уникальное состояние, состоящее из двух тяжелых кварков разных ароматов, называется B_c^+ -мезоном. Несмотря на то, что B_c^+ -мезон был открыт более 20 лет назад [1, 2], эта частица по-прежнему малоизучена, и до сих пор было обнаружено всего лишь несколько каналов распада этого состояния [3]. Исследования на Большом адронном коллайдере (БАК) ознаменовали новую эру для изучения B_c^+ -мезонов, которые были недоступны в предыдущем поколении экспериментов на электрон-позитронных ускорителях. Значительную роль в предоставлении экспериментальных данных по исследованию B_c^+ -мезонов на ускорителе БАК, играет эксперимент LHCb [4, 5], который на данный момент является единственной в мире лабораторией, позволяющей исследовать весь спектр тяжелых адронов, включая уникальное B_c^+ -состояние. В настоящем докладе представлены последние результаты по изучению новых редких распадов B_c^+ -мезонов в эксперименте LHCb. Исследование основано на данных, набранных в период с 2011 по 2018 гг.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации. Номер гранта МК-894.2022.1.2.

1. Abe F. et al. CDF Collaboration. Observation of the B_c meson in $p\bar{p}$ collisions at $\sqrt{s} = 1.8$ TeV // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 2432.
2. Abe F. et al. CDF Collaboration. Observation of the B_c meson in $p\bar{p}$ collisions at $\sqrt{s} = 1.8$ TeV // Phys. Rev. 1998. V. D58. P. 112004.
3. Zyla P. A. et al. Particle Data Group. Review of particle physics // Prog. Theor. Exp. Phys. 2020. V. 2020, and 2022 update. P. 083C01.
4. Alves A. A. Jr. et al. LHCb Collaboration. The LHCb Detector at the LHC // JINST. 2008. V. 3. P. S08005.
5. Aaij R. et al. LHCb Collaboration. LHCb detector performance // Int. J. Mod. Phys. 2015. V. A30. P. 1530022.

Экзосомы стволовых клеток и перспективы их использования в медицине

М.Г. Ратушняк

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

УДК 576:591.51:539.047

Актуальной проблемой современной биологии и медицины является поиск средств восстановления когнитивных функций, сниженных или нарушенных в результате развития нейродегенеративных заболеваний и повреждений мозга под действием факторов нейровоспаления, которое развивается при травме, гипоксии, инсульте и в отдаленный период после действия облучения при лучевой терапии опухолей мозга и опухолей в области головы и шеи. В экспериментальных работах убедительно показана эффективность клеточной терапии в лечении нейровоспаления и когнитивных расстройств путем введения в мозг в область гиппокампа нейральных стволовых клеток (НСК) и при травме мозга [1], и при нейродегенеративных заболеваниях [2], и после облучения головы [3]. Терапевтическое действие СК связывают не столько с их пролиферацией и дифференцировкой в нейроны и клетки глии, сколько с активностью секретируемых ими факторов, регулирующих функции соседних клеток мозга [3]. Учитывая сложность использования трансплантации СК в мозг, перспективным направлением в поиске способов стимуляции регенерации повреждений мозга и улучшения когнитивных функций становится изучение возможности использования вместо СК тех продуктов, которые эти клетки секретируют. Особый интерес в этом плане представляют экзосомы - природные наноразмерные частицы, формируемые и секретируемые различными клетками человека и животных и содержащих целый комплекс биологически активных веществ: ДНК, РНК, включая набор микроРНК, белки и др. [4].

Рассмотрены механизмы формирования экзосом в клетках и их секреции, методы выделения и идентификации экзосом из культуральной среды, кондиционированной СК в культуре, методы характеристики экзосом, анализируется состав биологически активных веществ, транспортируемых экзосомами.

Анализируются новые направления в диагностике и лечении ряда заболеваний на основе использования экзосом [5]. Приводятся данные об использовании экзосом для лечения нейродегенеративных заболеваний и состояний. Показана возможность повышения пострадиационной выживаемости и клоногенной активности облученных культивируемых НСК мышцы с помощью препаратов экзосом, выделенных из кондиционированной среды НСК и мезенхимальных СК (МСК) из жировой ткани мышцы. При исследовании влияния интраназального введения препаратов экзосом НСК мышцы после облучения головы животных в дозе 8 Гр на поведение и когнитивные функции животных в отдаленный период после воздействия показана возможность предотвращения отдалённых пострадиационных нарушений поведения и эпизодической памяти.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

1. Haus D.L., et al. Transplantation of human neural stem cells restores cognition in an immunodeficient rodent model of traumatic brain injury // *Exp Neurol*. 2016. V. 281. P. 1-16.
2. Blurton-Jones M. et al. Neural stem cells improve cognition via BDNF in a transgenic model of Alzheimer disease // *Proc Natl Acad Sci U S A*. 2009. Vol. 106. No 32. P. 13594-13599.
3. Acharya M.M. et al. Defining the optimal window for cranial transplantation of human induced pluripotent stem cell-derived cells to ameliorate radiation-induced cognitive impairment // *Stem Cells Transl Med*. 2015. V. 4. No 1. P. 74-83.
4. Smith S.M. et al. Functional equivalence of stem cell and stem cell-derived extracellular vesicle transplantation to repair the irradiated brain // *Stem Cells Transl Med*. 2020. V. 9. No 1. P. 93-105.
5. Ратушняк М.Г и др. Экзосомы – природные наночастицы для использования в терапии. // *Российские нанотехнологии*. 2020. Т. 15. No 4. С. 435–450.

Молекулярные основы происхождения и эволюции рода *Homo*: африканская прародина и генетический ароморфоз

Е.К. Шематорова, Г.В. Шнаковский

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
УДК: 577.1:577.214.(337+622) + 577.216 + 577.217.525

Проблема происхождения и эволюции человека волнует каждого из нас. Присуждение Нобелевской премии 2022 года в области физиологии или медицины шведскому учёному Сванте Паабо за развитие новой научной дисциплины, палеогеномики человека, ещё больше подогревает интерес к фундаментальному вопросу всей биологии: что именно делает нас людьми, способными творить и созидать, как никакое другое существо на планете Земля?..

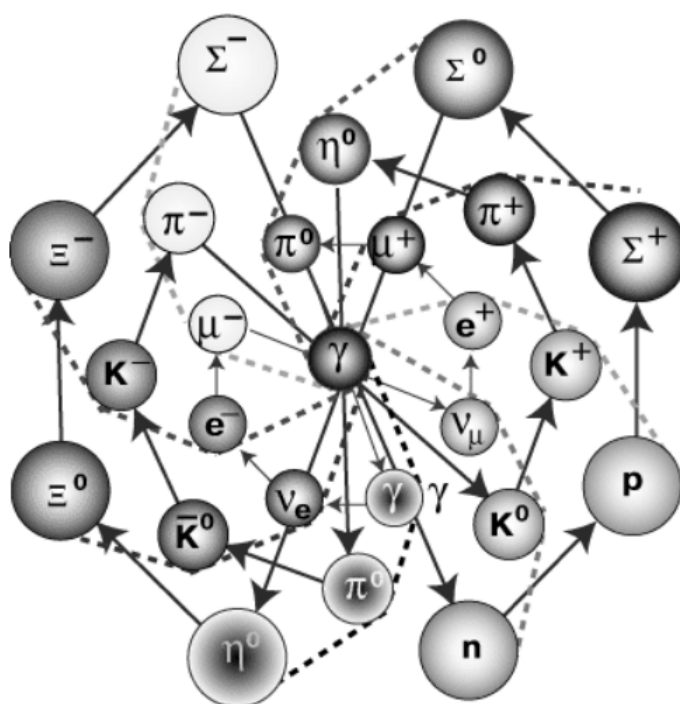
Детальный анализ имеющихся на сегодняшний день данных по молекулярной (геномной) эволюции человека ясно указывает, что ответ на этот вопрос лежит за пределами палеогеномики (по самым оптимистичным оценкам С. Паабо в лучшем случае ей могут быть доступны лишь ~500 тыс. лет нашей самой недавней эволюционной истории), поскольку решающие события генетической эволюции нашего вида произошли в Африке в период формирования и отделения рода *Homo* от других видов *Homininae* (включая австралопитеков и других представителей племени *Hominini*) в интервале ~ 6-1,5 *Mya* (млн. лет назад).

Изучив молекулярную эволюцию двух специфичных для высших приматов генных семейств, *POLR2J* системы транскрипции и *PMS2* системы репарации MMR, мы показали, что появление и совершенствование генетической структуры каждого из этих семейств чётко коррелируют с основными этапами биологической эволюции надсемейства *Hominioidea* (*Anthropomorhidae*), так что гены *PMS2* и *POLR2J* могут рассматриваться в качестве удобных и достоверных молекулярных маркеров антропогенеза [1-5]. Выяснилось, что умножение и диверсификация генов *POLR2J*, кодирующих незаменимую субъединицу РНК-полимеразы II RPB11, характерны только для *Homininae* (человекообразных обезьян Африки и всех *Australopithecina* и *Hominina*) и в период ~5.7-1.0 *Mya* происходили независимыми путями у родов *Gorilla*, *Pan* и *Homo*. Структурный (сравнение первичных и пространственных структур всех вариантов белка POLR2J с помощью AlphaFold) и функциональный (гетероспецифическая комплементация различных изоформ субъединицы hRPB11, выяснение их интерактома) анализ однозначно указывает на формирование у *Homo sapiens* особых комплексов генной экспрессии, содержащих новые, минорные изоформы субъединицы hRPB11 – продукты экспрессии эволюционно молодых генов *POLR2J2* и *POLR2J3* – в своём составе [6-10]. Такие изменения базовых компонентов основных молекулярно-биологических процессов затрагивают главные, системообразующие комплексы живой клетки и могут приводить к реальным эволюционным ароморфозам (по аналогии с морфологическими ароморфозами у А.Н. Северцова [11]).

Предложенная нами идея генетического ароморфоза, вызванного с виду небольшими, но кардинальными по функциональным последствиям изменениями незаменимого, ключевого компонента одного из универсальных молекулярно-биологических процессов, транскрипции, является логическим развитием двух наиболее ценных концепций, предложенных до сих пор для объяснения прогрессивной эволюции сложных геномов: сегментные геномные дубликации для формирования целых генных семейств в поисках новых или диверсифицированных функций (Сусуму Оно) [12] и преобладающая роль регуляторных мутаций в адаптивной эволюции *Homo sapiens* (Аллан Уилсон) [13].

1. Grandemange S., Schaller S., Yamano S., Du Manoir S., Shpakovski G.V., Mattei M-G., Kedingер C., Vigneron M. A human RNA polymerase II subunit is encoded by a recently generated multigene family // *BMC Molecular Biology*. 2001. V. 2: 14.
2. Шпаковский Д.Г., Шематорова Е.К., Шпаковский Г.В. Новые гены на хромосоме 7 человека: биоинформационный анализ кластера генов из семейства POLR2J // *Биоорганическая химия*. 2004. Т. 30. № 6. С. 621-625.
3. Shpakovski D.G., Shematorova E.K., Shpakovski G.V. Molecular evolution of genes from the *POLR2J* family on human chromosome 7 // *The FEBS Journal*. 2005. V. 272, Suppl. 1. P. 134.
4. Шпаковский Д.Г., Шематорова Е.К., Шпаковский Г.В. Семейство генов PMS2 человека: происхождение, молекулярная эволюция и биологический смысл // *Доклады Академии наук*. 2006. Т. 408. № 5. С. 699-703.
5. Шематорова Е.К., Шпаковский Д.Г., Шпаковский Г.В. Семейства генов *PMS2* и *POLR2J* как молекулярные маркеры эволюции высших приматов // *Генетика*. 2010. Т. 46. № 9. С. 1254–1257.
6. Benga W.J., Grandemange S., Shpakovski G.V., Shematorova E.K., Kedingер C., Vigneron M. Distinct regions of RPB11 are required for heterodimerization with RPB3 in human and yeast RNA polymerase II // *Nucleic Acids Research*. 2005. V. 33. No. 11. P. 3582–3590.
7. Прошкин С.А., Шематорова Е.К., Сулова Е.А., Прошкина Г.М., Шпаковский Г.В. Минорная изоформа субъединицы РНК-полимеразы II человека hRPB11 (POLR2J) взаимодействует с несколькими субъединицами фактора инициации трансляции eIF3 // *Биохимия*. 2011. Т. 76. № 8. С. 1195-1200.
8. Шематорова Е.К., Шпаковский Д.Г., Шпаковский Г.В. Новые комплексы генной экспрессии и их роль в возникновении и эволюции рода *Homo* // *Цитология*. 2013. Т. 55. № 3. С. 172-177.
9. Proshkin S.A., Shematorova E.K., Shpakovski G.V. The human isoform of RNA polymerase II subunit hRPB11 α specifically interacts with transcription factor ATF4 // *International Journal of Molecular Sciences*. 2019. V. 21(1):135.
10. Shematorova E.K., Shpakovski G.V. Current insights in elucidation of possible molecular mechanisms of the juvenile form of Batten disease // *International Journal of Molecular Sciences*. 2020. V. 21(21):8055.
11. Северцов А.Н. (1934). Главные направления эволюционного процесса. Биомедгиз (Москва-Ленинград). 151 С.
12. Ohno S. (1970). *Evolution by gene duplication*. Springer-Verlag (Berlin-Heidelberg). 160 P. ISBN 0-04-575015-7
13. King M.C., Wilson A.C. Evolution at two levels in humans and chimpanzees. 1975. V. 188. No. 4184. P. 107-116.

Физика атомного ядра и частиц



Рождение η_c -мезона с распадом в два фотона в обобщенной партонной модели при энергии коллайдера NICA

А.В. Ануфриев¹, В.А. Салеев¹

¹ Кафедра общей и теоретической физики, Самарский университет, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

УДК:539.1

С момента открытия в 1974 году J/ψ -мезона, физика тяжелых кваркониев всегда была в центре экспериментального и теоретического внимания. Одно из семейств кваркониев, именуемое чармонии – это связанное состояние c -кварка и его антикварка. Большая масса c -кварка позволяет проводить расчет сечения рождения пары $c\bar{c}$ кварков в рамках теории возмущений квантовой хромодинамики (КХД). Адронизация пары тяжелых кварка и антикварка в конечный кварконий, будучи в принципе непertурбативной, может быть описана в нерелятивистском приближении, когда пренебрегается относительным импульсом кварка и антикварка.

В программу экспериментальных исследований коллаборации SPD NICA входит измерение сечений и спектров чармониев в протон-протонных столкновениях при энергиях до 27 ГэВ [1]. В настоящей работе оценивается возможность измерения сечения рождения низшего энергетического состояния чармония - η_c -мезона в эксперименте SPD NICA в канале распада в два фотона, $\eta_c \rightarrow \gamma + \gamma$. Расчеты выполняются в обобщенной партонной модели и лидирующем порядке теории возмущений квантовой хромодинамики.

Рождение частиц с большими поперечными импульсами описывается в коллинеарной партонной модели (КПМ) [2], базирующейся на гипотезе факторизации, которая представляет дифференциальное сечение процесса в виде интегральных сверток коллинеарных партонных функций распределения (ПФР) [3] и сечения партонного подпроцесса. Однако, при малых поперечных импульсах ($p_T \leq 1$ ГэВ) необходимо учитывать непertурбативный поперечный импульс партонов в протоне, для этого используется обобщенная партонная модель (ОПМ) [4]. Как показывает сравнение теоретических расчетов с экспериментальными данными коллаборации LHCb [5], адронизация пары $c\bar{c}$ кварков в η_c может быть описана в модели цветовых синглетов (МЦС) [6].

В работе рассчитываются дифференциальные сечения рождения η_c -мезона в канале распада в два фотона с учетом конечной ширины промежуточного состояния. При расчете фонового процесса рождения двух фотонов с инвариантной массой, близкой к массе η_c , учитывается как прямое рождение фотонов, так и фрагментационный механизм рождения. Результаты расчетов в обобщенной партонной модели сравниваются с предсказаниями КПМ. Проводится анализ зависимости отношения сигнал-фон от различных ограничений на поперечные импульсы фотонов.

Работа выполнена при поддержке Министерства высшего образования и науки Российской Федерации, проект FSSS-2020-0014.

1. Arbuzov, A. Bacchetta, M. Butenschoen et al. On the physics potential to study the gluon content of proton and deuteron at NICA SPD//Progress in Particle and Nuclear Physics.-2021. - 103858. - С. 1-43
2. J. Collins. Foundations of Perturbative QCD (Cambridge Monographs on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology, 32) Cambridge University Press (Cambridge, UK, 2011).
3. A. Karpishkov, V. Saleev, M. Nefedov. Estimates for the single-spin asymmetries in the $p\uparrow p \rightarrow J/\psi X$ process at PHENIX RHIC and SPD NICA // Phys.Rev.D 104 (2021) 1, 016008
4. J. Collins, D. Soper. Parton distribution and decay functions // Nucl. Phys. B. 1982. V.194. - P. 445-4921
5. M. Butenschoen, Zhi-Guo He, and B. A. Kniehl. η_c Production at the LHC Challenges Nonrelativistic QCD Factorization // Phys. Rev. Lett. 114 (2015), 092004
6. C. Carlson and R. Suaya. Hadronic production of the J/ψ meson // Phys. Rev. D 14, 3115 (1976)

Активные мишени в экспериментах по изучению свойств радиоактивных ядер

А.Ю. Арутюнова^{1,2}, А.Г. Инглесси¹, Е.М. Маев¹

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

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург

Планируемый детектор – активная мишень (АСТАФ) предназначен для регистрации частиц отдачи в исследованиях прямых реакций с радиоактивными пучками при малых переданных импульсах. Конструкция основана на опыте по созданию первого поколения установок - активной мишени ИКАР, использовавшейся в предыдущих экспериментах в ПИЯФ, CERN и GSI, но существенно модернизированной в плане изучения большего разнообразия реакций и более тяжелых пучков вплоть до урана. Предполагается, что активная мишень (АСТАФ) будет являться частью установки коллаборации R3B и позволит регистрировать частицы отдачи в совпадении с тяжелыми осколками, нейтронами и γ -квантами [1]. Таким образом, эта установка дает уникальную возможность изучать упругие, неупругие, зарядового обменные и другие реакции при низких переданных импульсах, что значительно расширяет возможности коллаборации R3B в исследованиях ядерной структуры радиоактивных экзотических ядер. Активная мишень (АСТАФ) представляет собой аксиально-симметричную ионизационную камеру с азимутальным угловым захватом 2π и с эффективностью регистрации частиц отдачи (протонов, дейтронов и α -частиц), близкой к 100% в исследуемом интервале энергий.

АСТАФ сконструирован таким образом, чтобы он размещался внутри гамма-детектора CALIFA. Максимальное давление в АСТАФ определяется толщиной стенки, которая выбрана для оптимизации эффективности детектирования гамма-лучей, регистрируемых детектором CALIFA. Полная энергия частицы отдачи (T_r) измеряется в ионизационной камере с точностью $\sigma(T_r) = 20-30$ кэВ в диапазоне энергий от 0.3 МэВ до 20 МэВ. Энергетический порог составляет ~ 150 кэВ, что обеспечивает $\sim 100\%$ эффективность регистрации частиц отдачи с $T_r > 300$ кэВ. Метод активной мишени позволяет определить энергию частиц отдачи (T_r), соответствующие полярные углы частиц отдачи (θ_r) и Z-координаты вершин взаимодействия вдоль оси камеры [2]. Полярные углы частиц отдачи (протонов, дейтронов или ядер гелия) могут быть измерены с точностью (σ_θ) несколько мрад. Z-координата точки взаимодействия (вдоль оси пучка) измеряется с точностью (σ_z) ~ 0.5 мм. Это дает возможность отбирать полезные события внутри эффективного объема газа и устранять фоновые события, возникающие из-за взаимодействия со стенками камеры на уровне $\sim 10^{-4}$. АСТАФ обеспечивает возможность работы с различными газами (H_2 , D_2 , He, CH_2) при давлении от 0.1 до 10 бар. Конструкция специальной сегментированной анодной плоскости АСТАФ дает возможность различать типы частиц отдачи (p, d, t, 3He и 4He), используя корреляцию между энергией и пробегом частиц отдачи. Активная мишень имеет специальную многоанодную структуру, которая обеспечивает возможность работы с очень тяжелыми (вплоть до урана) радиоактивными пучками.

Экспериментальные данные, полученные при тестовых экспериментах с прототипом АСТАФ, доказали возможность регистрации различных типов частиц отдачи с низкими энергиями (до 0.4 МэВ) и эффективностью, близкой к 100% при энергетическом разрешении 20-30 кэВ.

1. Technical Report for the Design, Construction and Commissioning of the active target for R3B experiment // URL: https://edms.cern.ch/ui/file/1816116/1/TDR_R3B_ACTAF_public.pdf

2. G.D. Alkhazov et al. // GSI Scientific Report 2014. - GSI, 2015. - С. 191.

Моделирование формы импульсов германиевых детекторов с помощью нейронных сетей

Н. Д. Зарецкий^{1,2}, А. Е. Черногоров¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

УДК: 53.01

В настоящее время в анализ данных экспериментов по физике элементарных частиц активно внедряются технологии машинного обучения. С помощью нейронных сетей и прочих моделей могут выполняться задачи определения координаты прохождения частиц в детекторе, задачи по классификации частиц, а также задачи по удалению фона [1].

В данной работе исследуется возможность генерации формы импульса событий, полученных на германиевых детекторах, с помощью генеративно-состязательных нейронных сетей [2] и алгоритма BAGAN [3]. Характерной отличительной особенностью представленной нейронной сети является наличие сети-автокодировщика, что позволяет существенно уменьшить количество признаков, используемых нейронной сетью, тем самым улучшая результат. В докладе представлены основные принципы работы германиевых детекторов, структура нейронной сети, а также результаты моделирования формы импульса для германиевых детекторов. Для оценки полученных результатов использовались такие параметры, как амплитуда зарядового и токового импульсов, время нарастания и склон сигнала.

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

1. I.J. Arnquist. *et al.* Learning Physics from the Machine: An Interpretable Boosted Decision Tree Analysis for the Majorana Demonstrator. // 2022
2. I.J. Goodfellow. *et al.* Generative Adversarial Networks. // 2014
3. G. Mariani. *et al.* BAGAN: Data Augmentation with Balancing GAN. // 2018

Корреляции адронов с большими поперечными импульсами в столкновениях на коллайдере NICA

А.В. Зеленов¹, В.Т. Ким, А.А. Шаврин¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

УДК: 539.12, 539.125, 539.126

На готовящемся в Дубне на коллайдере NICA эксперименте SPD изучение корреляций адронов с большими поперечными импульсами с учетом мультикварковых степеней свободы дает возможность пролить свет на различные аспекты: начиная с мультикварковых флуктонов, дикварков, многопартонных взаимодействий и заканчивая рождением экзотических многокварковых резонансов.

Проведено моделирование рассматриваемых процессов с помощью разрабатываемого в ОФВЭ, ПИЯФ Монте-Карло генератора физических событий ULYSSES [1], основанного на PYTHIA 8.

Изучены двух-частичные корреляции каонов, пионов, протонов и нейтронов, необходимые для выяснения особенностей многопартонных взаимодействий и дикварковых степеней свободы. Выполнено сравнение с имеющимися данными на ускорителях на Теватроне в FNAL [2] и ИФВЭ в Протвино [3].

1. Abramov V. V. et al. Possible studies at the first stage of the NICA collider operation with polarized and unpolarized proton and deuteron beams // *Physics of Particles and Nuclei* 52.6 (2021): 1044-1119.
2. Antreasyan D. et al. Production of hadrons at large transverse momentum in 200-GeV, 300-GeV and 400-GeV pp and pn Collisions // *Phys. Rev. D* 19, 764–778 (1979).
3. Abramov V. V. et al. Large transverse momentum inclusive hadron production in pp collisions at 70 GeV // *Sov. J. Nucl. Phys.* 41, 445–451 (1985).

Рассеяние релятивистских закрученных электронов на мезоскопической атомной мишени

В.К. Иванов¹, Д.В. Карловец¹, С.С. Батурин¹

*¹Университет ИТМО, Санкт-Петербург
УДК: 539.171.016*

В данном докладе будет рассматриваться процесс рассеяния релятивистских закрученных (то есть с определенным значением проекции орбитального момента) электронов на атоме (моттовское рассеяние) для случая мезоскопической (то есть мишени с размером, сопоставимым с размером волнового пакета рассеиваемой частицы) мишени. Подобный процесс был рассмотрен в статье [1] для нерелятивистских частиц, а также в статье [2] для релятивистских частиц в случае одинарного атома и макроскопической мишени.

Рассеяние на атомах для закрученных электронов чувствительно к форме волнового пакета и поэтому может использоваться для экспериментального изучения свойств волновых пакетов закрученных электронов. Характер процесса рассеяния в случае закрученных частиц имеет свои особенности для одинарного атома и для макроскопической мишени – в случае второй пропадает зависимость от значения проекции углового момента [2]. Поэтому интерес представляет изучение мезоскопической мишени, являющейся промежуточным случаем между этими двумя и является, в отличие от рассеяния на одинарном атоме, более удобным для проведения эксперимента.

В этой работе получены амплитуды и численные значения для углового распределения рассеянных частиц для процесса рассеяния релятивистских электронов на мезоскопической атомной мишени, проведено сравнение с ранее изученными случаями рассеяния на одинарном атоме и на макроскопической мишени.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ: «Взаимодействие закрученного света с отдельными атомами и атомными ансамблями». Номер соглашения: 21-42-04412 от 11.11.2020

1. Karlovets D. V. et al. Scattering of twisted electron wave–packets by atoms in the Born approximation // Phys. Rev. A. 2017. V. 95, № 3. P. 032703.
2. Serbo V. et al. Scattering of twisted relativistic electrons by atoms // Phys. Rev. A. 2015. V. 92, № 1. P. 012705.

Two-photon transition in one-electron and one-muon ions

V. A. Knyazeva^{1,2}, K. N. Lyashchenko^{1,3}, O. Yu. Andreev^{1,3}

¹ St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

² D.I. Mendeleev Institute for Metrology, St. Petersburg, Russia

³ Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”, Gatchina, Leningrad District, Russia

UDC: 539.18

We investigated two-photon decay of 2s state in one-electron and one-muon ions with atomic numbers $1 \leq Z \leq 120$ [1]. Due to the nuclear size corrections, the radiative decay of the 2s state in the electron and muon ions is qualitatively different.

It is well known and confirmed in our research that the angular distribution of the emitted photons is determined by the dominant E1E1 transitions. These transitions give $1 + \cos^2(\theta)$ distribution, where θ is the angle between the momenta of the emitted photons.

The deviation from $1 + \cos^2(\theta)$ distribution in the nonrelativistic limit was investigated in [2]. The reason for this deviation is the interference between E1E1 and the higher multipoles (mainly E2E2 and M1M1). The deviation leads to an asymmetry of the angle-differential transition probability. This asymmetry for unpolarized emitted photons investigated in [3]. Based on our relativistic calculations and works [2,4], we introduced a two-parameter approximation, which makes it possible to describe the two-photon angular-differential transition probability for the polarized emitted photons with high accuracy. In this approximation the differential transition probability can be approximated by two parameters: the total two-photon transition probability and the asymmetry factor A.

Within the two-parameter approximation, the asymmetry factor determines the asymmetry of the angle-differential transition probability. The accuracy of our approximation is 10^{-3} % for light ions, remaining within 1% even for the superheavy ions (for the photons with equal energies). The asymmetry factor calculated by the nonrelativistic formula [2] shows a significant deviation from the relativistic calculation for heavy ions. In particular, for superheavy elements, the deflection reaches 3 times. The main contribution to the asymmetry factor is made by the negative continuum of the Dirac spectrum. For precise experiments, it can be important that a nonzero asymmetry factor, even for light ions, could be a source of nonresonant corrections [5].

Using this approximation, we investigated the emission of photons with linear and circular polarizations. We also studied the transition probabilities for the polarized initial and final electron states.

This research was supported by the Russian Science Foundation under Grant No. 22-12-00043.

1. V. A. Knyazeva, K. N. Lyashchenko, M. Zhang, D. Yu and O. Yu. Andreev *Phys. Rev. A* **106** 012809 (2022).
2. C. K. Au, *Phys. Rev. A* **14** 531 (1976).
3. A. Surzhykov, J. P. Santos, P. Amaro, and P. Indelicato *Phys. Rev. A* **71** 022509 (2005).
4. N. L. Manakov *et al. Journal of Physics B* **33** 4425 (2000).
5. O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, and D. A. Solov'yev *Physics Reports* **455** 135 (2008).

Изучение ядерных изомеров с помощью метода фазового отображения

Ю. В. Нечипоренко

Лаборатория физики Экзотических ядер ПИЯФ- НИЦ «Курчатовский институт» и Санкт-Петербургский государственный университет

УДК: 539.18

Ядерными изомерами называются нуклиды, имеющие одинаковый нуклонный состав, но разные энергии возбуждения и квантовые числа. Тип, энергия возбуждения и время жизни метастабильного состояния зависят от структуры ядра. Т. е. экспериментальное измерение параметров распада изомера позволяет получить информацию о структуре ядра. Это особенно интересно в области сверхтяжелых, где большие отличия квантовых чисел возбужденных уровней являются причиной возникновения метастабильных состояний. Эти изомерные состояния могут быть заселены в ходе девозбуждения компаунд-ядра после реакции слияния. Экспериментальные данные о структуре сверхтяжелых ядер являются отличным тестом теоретических предсказаний и несут информацию о замкнутых ядерных оболочках, которая необходима для поиска острова стабильности [1,2].

Но измерение параметров распада изомерных состояний классическим ядерно-спектрометрическими методами в области сверхтяжелых нуклидов затруднено малостью их сечения образования, а также сложностью структуры уровней ядра. Метод фазового отображения позволяет получить информацию об энергии возбуждения метастабильного состояния и его время жизни.

Метод фазового отображения ионного циклотронного резонанса (PI-ICR), это метод определения циклотронной частоты иона, захваченного в ловушке Пеннинга. Циклотронная частота иона зависит от его заряда и массы, которая несет в себе информацию об энергии возбуждения метастабильного состояния. Этот метод основан на проецировании накопленной фазы радиального движения ионов в ловушке на позиционно-чувствительный детектор [3,4].

В данном докладе будет рассказано о применении этого метода для изучения изомерных состояний на примере нуклида ^{200}At .

1. Walker P., Dracoulis G. Energy traps in atomic nuclei //Nature. – 1999. – Т. 399. – №. 6731. – С. 35-40.
2. Oganessian Y. et al. Route to islands of stability of superheavy elements //Physics of Atomic Nuclei. – 2000. – Т. 63. – №. 8. – С. 1315-1336.
3. Eliseev S. et al. Phase-imaging ion-cyclotron-resonance measurements for short-lived nuclides //Physical Review Letters. – 2013. – Т. 110. – №. 8. – С. 082501.
4. Eliseev S. et al. A phase-imaging technique for cyclotron-frequency measurements //Applied Physics B. – 2014. – Т. 114. – №. 1. – С. 107-128.

Изотопический сдвиг в атоме таллия

Г. О. Пенязьков^{1,2}, С. Д. Просняк^{1,2}, Л. В. Скрипников^{1,2}

¹НИЦ КИ - ПИЯФ, Гатчина, Россия

²СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

УДК: 539.18

Изучение изотопических сдвигов энергий электронных переходов в атомах может служить источником информации об одном из самых важных свойств ядра — среднеквадратичном радиусе. На сегодняшний день имеется большое количество экспериментальных результатов по измерению изотопического сдвига в различных атомах. В частности, подобные эксперименты для различных электронных состояний проводились на установке ИРИС в НИЦ КИ-ПИЯФ для атома таллия [1]. Однако, для определения разности радиусов между различными изотопами, необходимо также знать величину электронных факторов. В свою очередь, рассчитанные величины электронных факторов для многих атомов имеют довольно большую погрешность или не рассчитаны вовсе.

Изотопические сдвиги имеют два вклада: полевой (связанный с изменением среднеквадратического зарядового радиуса ядра) и массовый (связанный с эффектом отдачи). Массовый вклад в свою очередь делится на нормальный и специфический. Для атома Tl полевой фактор был рассчитан ранее [2].

В нашей работе мы уточняем значение полевого сдвига, а также вычисляем нормальный и специфический массовые сдвиги для электронных переходов 535nm, 277 nm и 378 nm в нейтральном таллии на высоком уровне учёта эффектов электронной корреляции вплоть до вклада четырёхкратных кластерных амплитуд релятивистского метода связанных кластеров. Данные результаты помогут интерпретировать полученные в экспериментальные данные [1] на новом уровне точности.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10019) и гранта Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 21-1-2-47-1).

1. A. E. Barzakh, L. Kh. Batist, D. V. Fedorov, V. S. Ivanov, K. A. Mezilev, P. L. Molkanov, F. V. Moroz, S. Yu. Orlov, V. N. Panteleev, Yu. M. Volkov, Phys. Rev. C 88, 024315 (2013)
2. Ann-Marie Mårtensson-Pendrill, Phys. Rev. Lett. 74, 2184 (1995)

Комбинация результатов по поиску невидимых распадов Бозона Хиггса на частицы темной материи в эксперименте АТЛАС

М.В. Покидова^{1,2}, Я.А. Бердников^{1,2}, Ю.Г. Нарышкин¹

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

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

УДК: 539.1

После открытия бозона хиггса в 2012 году в экспериментах ATLAS и CMS поиск новой физики является наиболее актуальной задачей современных исследований, проводимых на Большом адронном коллайдере (БАК) [1]. Некоторые модели новой физики () предполагают распад бозона Хиггса на пару слабо взаимодействующих массивных частиц (WIMP), которые являются кандидатом на роль частиц Темной Материи (ТМ) [2]. Такие модели, где бозон Хиггса действует как частица-посредник между частицами ТМ и частицами Стандартной модели (СМ) называются “порталом Хиггса”, и являются основой исследований по поиску невидимых распадов бозона Хиггса на частицы ТМ в эксперименте ATLAS [3].

Поиск невидимых распадов Бозона Хиггса проводится в различных процессах его образования. Результаты, полученные в различных процессах, комбинируются с целью улучшения точности полученных верхних пределов на вероятность распада бозона Хиггса на частицы ТМ [4]. В работе были использованы данные эксперимента ATLAS, полученные во втором периоде работы БАК (2015-2018 годах) при энергии столкновений протонов в системе центра масс $\sqrt{s} = 13$ ТэВ, соответствующие интегральной светимости 139 фбн^{-1} . Для достижения максимально возможной чувствительности были рассмотрены основные каналы рождения бозона Хиггса предсказанные в СМ (VBF, VBF+gamma, ttH, моно-jet, моно-Z), в которых конечное состояние характеризуется большим значением поперечной энергии E_T^{miss} и дополнительными физическими объектами, характерными для заданного процесса [5-8]. Был выполнен анализ перекрытия событий между данными каналами и проведено исследование по уменьшению перекрытия между каналами VBF и моно-jet путем установления дополнительных ограничений на отбор сигнальных событий.

1. Нисати А., Тонелли Г. Открытие бозона Хиггса на Большом адронном коллайдере / Пер. с англ. И.Н.Горбунова, А.В.Зарубина, С.В.Шматова. — Дубна: ОИЯИ, 2018.

2. Feng, Jonathan L. Dark Matter Candidates from Particle Physics and Methods of Detection. Annual Review of Astronomy and Astrophysics 48.1 .2010.

3. G. Arcadi, A. Djouadi, M. Raidal. Dark Matter through the Higgs portal, Physics Reports, Volume 842, 2020.

4. The ATLAS Collaboration, Combination of searches for invisible Higgs boson decays with the ATLAS experiment, ATLAS-CONF-2020-052

5. The ATLAS Collaboration. Search for invisible Higgs-boson decays in events with vector-boson fusion signatures using 139 fb^{-1} of proton-proton data recorded by the ATLAS experiment

6. The ATLAS collaboration. Observation of electroweak production of two jets in association with an isolated photon and missing transverse momentum, and search for a Higgs boson decaying into invisible particles at 13 TeV with the ATLAS detector. Eur. Phys. J. C 82, 2022.

7. The ATLAS collaboration. Search for dark matter and other new phenomena in events with an energetic jet and large missing transverse momentum using the ATLAS detector. J. High Energ. Phys. 2018.

8. ATLAS Collaboration, Search for associated production of a Z boson with an invisibly decaying Higgs boson or dark matter candidates at $s=13$ TeV with the ATLAS detector, Physics Letters B Volume 829, 2022.

Изучение электронной структуры атома золота для определения радиуса ядра золота

С.Д. Просняк^{1,2}, Л.В. Скрипников^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

²СПбГУ, Санкт-Петербург

УДК: 539.143.5

Одним из наиболее интересных свойств атомного ядра является его среднеквадратичный зарядовый радиус. Измерить данную величину можно с помощью нескольких различных типов экспериментов [1, 2]. Одним из них является наблюдение изотопического сдвига в атомных спектрах. Важной особенностью данного метода является возможность определять радиусы короткоживущих ядер. Для нахождения радиуса из экспериментальных данных для одного перехода оказываются необходимы константы массового и полевого сдвигов. В связи с проведением данного эксперимента для ряда изотопов атома золота были выполнены расчёты этих констант. Ключевой особенностью проведённых расчётов стал детальный анализ теоретической погрешности. Было показано, что использование современных методов расчёта электронной структуры позволяет добиться высокого уровня точности для рассматриваемого в данном случае атома золота.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-72-10019.

1. Fricke G. et al. Nuclear ground state charge radii from electromagnetic interactions //Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1995. – Т. 60. – №. 2. – С. 177-285.
2. Angeli I., Marinova K. P. Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update //Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2013. – Т. 99. – №. 1. – С. 69-95.

Исследования фотоядерных реакций с испусканием заряженных частиц на тяжёлых ядрах

П.Д. Ремизов¹, М.В. Желтоножская¹, А.П. Черняев¹, В.Н. Яценко², О.В. Яценко²

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

²ФГБУ ГНЦ ФМБЦ им. А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва

УДК: 539.163

Возбуждение коллективных степеней свободы ядра считается основным механизмом фотоядерных реакций для фотонов с энергиями 10–30 МэВ [1]. В то же время современной статистической теории ядра не удаётся предсказать экспериментальные выходы реакций с испусканием заряженных частиц под действием фотонов на этом диапазоне энергий. Для средних ядер экспериментальные значения выходов фотопротонных реакций в разы превышают теоретические [2], для тяжёлых – на порядки [3]. Это происходит благодаря замедленному формированию кулоновского барьера.

В реакциях с испусканием альфа-частиц выходы, рассчитанные на основе коллективной модели ядра, также не соответствуют экспериментальным данным. Реакции вида $(\gamma, \alpha n)$ происходят при энергиях фотонов ниже кулоновского барьера [4, 5]. Это свидетельствует о полупрямом механизме данных реакций.

Нами изучены фотоядерные реакции с испусканием заряженных частиц при облучении вольфрама, гафния и тантала тормозным излучением ускорителей электронов различных энергий. Ниже приведены экспериментальные значения выходов реакций в мкб. В скобках указаны теоретические значения, рассчитанные на основе статистической модели программным кодом TALYS.

20 МэВ

$^{179}\text{Hf}(\gamma, p)^{178\text{m}}\text{Lu}$: 103 ± 10 (0.13)

$^{180}\text{Hf}(\gamma, p)^{179\text{m}+g}\text{Lu}$: 465 ± 50 (0.2)

$^{181}\text{Ta}(\gamma, p)^{180\text{m}}\text{Hf}$: 51 ± 5 (1)

40 МэВ

$^{181}\text{Ta}(\gamma, p)^{180\text{m}}\text{Hf}$: 69 ± 9 (20)

$^{181}\text{Ta}(\gamma, \alpha)^{177}\text{Lu}$: 33 ± 8 (0.16)

$^{184}\text{W}(\gamma, \alpha)^{180\text{m}}\text{Hf}$: 1.0 ± 0.2 (0.004)

$^{186}\text{W}(\gamma, \alpha)^{182\text{m}}\text{Hf}$: 5.7 ± 1.7 (0.001)

55 МэВ

$^{181}\text{Ta}(\gamma, p)^{180\text{m}}\text{Hf}$: 56 ± 6 (28)

$^{184}\text{W}(\gamma, \alpha)^{180\text{m}}\text{Hf}$: 2.5 ± 0.3 (0.005)

$^{186}\text{W}(\gamma, \alpha)^{182\text{m}}\text{Hf}$: 2.8 ± 0.9 (0.003)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20119, <https://rscf.ru/project/22-22-20119/>

1. Ишханов Б. С. Гигантский дипольный резонанс в атомных ядрах // Ученые записки физического факультета Московского Университета. — 2014. — № 3. — С. 143201–1–143201–10.
2. Photonuclear reactions on titanium isotopes 46-50ti / S. S. Belyshev, L. Z. Dzhilavyan, B. S. Ishkhanov et al. // Moscow University Physics Bulletin. — 2014. — Vol. 69, no. 5. — P. 363–373.
3. Zheltonozhsky V., Savrasov A. Investigation of (γ, p) -reactions on zirconium and molybdenium nuclei // The European Physical Journal A. 2022. Т. 58. № 7.
4. Zheltonozhskaya M. V., Remizov P. D., Chernyaev A. P. Investigation of $(\gamma, \alpha xn)$ reactions on ^{93}Nb // LXXII International conference “NUCLEUS-2022: Fundamental problems and applications” (Moscow, July 11–16, 2022): Book of abstracts. — Amirit Саатов, 2022. — P. 138–139.
5. Zheltonozhskaya M. V., Remizov P. D., Chernyaev A. P. Study of reactions with the α -particle emission at $E_{\text{max}} = 20$ mev on natural zirconium targets // LXXII International conference “NUCLEUS-2022: Fundamental problems and applications” (Moscow, July 11–16, 2022): Book of abstracts. — Amirit Саатов, 2022. — P. 280–280.

**Особенности распределения изотопов урана
на границе полярной и неполярной среды
Д.А.Румянцева¹, В.Г. Зиновьев¹, И.А.Митропольский^{1,2}**

¹ФГБУ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, г. Гатчина, Россия

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

УДК: 539.1

Использование спектрометрических методов для определения содержания элементов из состава продуктов деления и изотопного состава растворов весьма актуально [1-3]. Они относятся к ядерной энергетике и могут быть использованы для измерения концентрации и изотопного состава урана, как для технологического контроля герметичности ТВС, так и в радиохимическом производстве для корректировки изотопного состава ядерного топлива.

Для увеличения чувствительности метода использовалась адсорбция комплекса $UO_2(NO_3)_2 \cdot 2ТБФ$ на поверхности полипропилена (C_3H_6)_n в экстракционной системе на основе раствора азотной кислоты и экстрагента трибутилфосфата (ТБФ). Молекула ТБФ является полярной и поверхностно активной молекулой. Такие дифильные молекулы [4], взаимодействуя одновременно с полярными и неполярными средами, самопроизвольно накапливаются на границе раздела полярной и неполярной фаз.

Оценка изотопного распределения происходила после обработки и анализа γ -спектров образцов на разной глубине от поверхности раствора. Изотопное распределение получено из расчета отношений интенсивностей линий γ -излучения с энергиями 185.739 и 92.7 кэВ (I_{185}/I_{92}), а также отношение интенсивностей гамма-излучения с энергиями 185.739 и 1000.997 кэВ (I_{185}/I_{1001}) в спектрах аликвот. Отношений интенсивностей аналитических линий I_{185}/I_{92} и I_{185}/I_{1001} пропорциональны обогащению урана по изотопам ^{234}U и ^{235}U . В пленке на границе раздела, у поверхности раствора ($h = 0$) концентрация ^{235}U равна 1.49 ± 0.02 ат. %, а отношение концентраций ^{235}U и ^{238}U составило $(1.49 \pm 0.02)/(98.5 \pm 8) = 0.0151 \pm 0.0014$ [6].

Также методом рентгенофлуоресцентного анализа получены и проанализированы спектры вторичного рентгеновского излучения растворов. Исследовано распределение концентрации урана вдоль границы раздела твердой и жидкой фаз в водной фазе и в органической фазе вдоль оси симметрии стакана в направлении от поверхности раствора до дна стакана.

Таким образом, экспериментально показано, что полипропилен (неполярный компонент) прочно удерживает комплекс $UO_2(NO_3)_2 \cdot 2ТБФ$ в верхней части на границе раздела полярной и неполярной фаз. При этом более легкие изотопы урана собираются в верхних слоях пленки состоящей из молекул комплекса $UO_2(NO_3)_2 \cdot 2ТБФ$. Концентрация увеличилась: по ^{234}U с 0.0016 ± 0.0003 ат.% в исходном растворе до 0.017 ± 0.002 ат.%, по ^{235}U с 0.471 ± 0.007 ат.% в исходном растворе до 1.49 ± 0.02 ат.%.

1. Maomi S., Tetsuya M., Kunihiko T. Redox uranium isotope separation using anion exchangers. // пат. B01D 59/30 US 4118457, 1973.

2. Дельваль П. Способ химического изотопного обогащения урана. // пат. B01D 59/28 SU 867283 АЗ, 1981.

3. Пахолков В.С., Зеленин В.И., Цевин А.П. Способ извлечения урана из разбавленных растворов // пат. РФ 1349288, 1987

4. Крамаренко Е.Ю., Гордиевская Ю.Д. Принципы самоорганизации в растворах амфифильных молекул. // Москва: Российская академия наук, с. 27, 2017.

5. Зиновьев В.Г., Румянцева Д.А., Митропольский И.А. и др. Способ химического обогащения урана легкими изотопами. // пат. G21C 19/42. RU 2756277 С1, 2021.

Генерация закрученных фотонов в спиральных ондуляторах

Г.К. Сизых¹, Д.В. Карловец¹

¹Университет ИТМО, Санкт-Петербург

УДК: 530.145.84, 537.87

Излучение с орбитальным угловым моментом (см., например, обзор [1]) нашло множество применений в таких областях науки как коммуникации (классические и квантовые), биофизика, микромашинерия, материаловедение и других (см., например, обзор [2]). Перспективно выглядит применение закрученных фотонов жёсткого рентгеновского и гамма-диапазонов в физике наноструктур, физике частиц, ядерной физике. Стабильные источники таких фотонов, однако, на данный момент отсутствуют. В работе изучается возможность генерации жёстких рентгеновских и гамма-фотонов с определённой проекцией углового момента электронами в спиральном ондуляторе.

Известно, что при классическом рассмотрении задачи излучения электронами, движущимися по спирали, поле излучения несёт ненулевой орбитальный угловой момент [3]. В то же время наличие углового момента у конечных фотонов при квантовом рассмотрении существенно зависит от схемы измерения, что показано в нашей работе.

Поскольку нас интересуют фотоны высоких энергий, мы также рассматриваем высокоэнергичные электроны, распространяющиеся в спиральном ондуляторе. Известно [4], что в этом случае уравнение Дирака сводится к уравнению Дирака для электрона в поле плоской монохроматической циркулярно-поляризованной электромагнитной волны. Таким образом, наша задача сводится к рассмотрению нелинейного эффекта Комптона волковским электроном [5].

Мы проводим квантовоэлектродинамическое рассмотрение процесса излучения фотона электроном во внешнем поле в первом порядке теории возмущений. Мы находим конечное двухчастичное состояние системы с помощью матричного элемента оператора рассеяния, а затем проецируем его на фиксированное состояние детектора конечного электрона, поскольку интересуемся только состоянием конечного фотона. Векторный потенциал конечного фотона в координатном представлении, как и матричный элемент оператора рассеяния может быть записан в виде суммы по номеру гармоники, который соответствует количеству поглощённых в процессе «фотонов» внешнего поля.

В работе показано, что полученное таким образом состояние конечного фотона и то, является ли оно закрученным, существенным образом зависит от состояния детектора, измеряющего конечный электрон. При использовании классической схемы измерений азимутальный угол импульса конечного электрона известен, следовательно, в силу сопряжённости этой переменной орбитальному угловому моменту угловой момент электрона абсолютно не определён и в силу квантовой запутанности не определён угловой момент фотона. В то же время, при детектировании конечного электрона без измерения азимутального угла его импульса при проецировании его на состояние с определённым орбитальным угловым моментом, равным нулю, весь угловой момент системы начальный электрон + «фотоны» внешнего поля переходит конечному фотону, который, таким образом, оказывается закрученным.

Исследование выполнено при поддержке Российского Научного Фонда (номер соглашения: 21-42-04412).

1. Knyazev B.A., Serbo V.G. Beams of Photons with Nonzero Orbital Angular Momentum Projection: New Results // Phys. Usp. 2018. V. 61. P. 449–479.
2. Padgett M.J. Orbital Angular Momentum 25 Years On // Optics Express. 2017. V. 25. No. 10. P. 11265–11274.
3. Sasaki S., McNulty I. Proposal for Generating Brilliant X-Ray Beams Carrying Orbital Angular Momentum // Phys. Rev. Lett. 2008. **100**, P. 124801.
4. Heinzl T., Ilderton A., King B. Classical and Quantum Particle Dynamics in Univariate Background Fields // Phys. Rev. Lett. 2008. **100**, P. 124801.
5. Volkov D.M. Uber eine Klasse von Losungen der Diracschen Gleichung // Z. Phys. 1935. V. 94 P.

Новые спектры антинейтрино тяжелых делящихся изотопов урана и плутония

С.В. Силаева², А.П. Власенко^{1,2}, П.Ю. Наумов¹, В.В. Синев^{1,2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет (МИФИ), Москва

² Институт ядерных исследований Российской академии наук (ИЯИ РАН), Москва

УДК: 539.123

Энергетический спектр антинейтрино ядерного реактора представляет собой фундаментальную характеристику реактора. Антинейтрино, вылетая из активной зоны реактора, проникают через все защиты и несут информацию о цепной реакции в активной зоне. Спектр антинейтрино уникален для каждого типа реакторов и зависит от состава ядерного топлива. Именно поэтому, как только было обнаружено различие спектров разных компонент топлива, встал вопрос о контроле ядерного реактора по его антинейтринному излучению [1].

Известно, что в реакторах типа ВВЭР горят преимущественно четыре изотопа: ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu и ^{241}Pu . Детектор на некотором расстоянии от реактора может зарегистрировать суммарный антинейтринный спектр от этих изотопов. В течение кампании реактора состав активной зоны изменяется и соответственно меняется энергетический спектр антинейтрино. Можно определять состав активной зоны, описывая измеряемый спектр суперпозицией спектров индивидуальных изотопов. Однако, при этом возникает вопрос о точности в значениях индивидуальных спектров. В самом начале экспериментов с реакторными антинейтрино индивидуальные спектры делящихся изотопов находили расчетным путем [2,3], однако точность этих расчетов была невелика в основном из-за не очень хорошего знания значений антинейтринных спектров осколков деления, вероятностей их бета-переходов и выходов при делении. В настоящей работе представлен новый расчет спектров антинейтрино делящихся изотопов урана и плутония, основанный на модернизированной нами базе данных осколков деления. В имеющейся базе данных для осколков с неизвестными схемами распадов использовалась силовая функция для описания вероятностей бета-переходов ядра неизвестных осколков. Силовая функция подбиралась для наилучшего описания спектра антинейтрино, полученного экспериментально в Ровенском эксперименте [4,5]. Вычисленные с этими спектрами сечения делящихся изотопов хорошо описывают экспериментально полученное сечение в эксперименте Double Chooz [6] $^{\text{DC}}\sigma_f = (5.71 \pm 0.06) \times 10^{-43} \text{ см}^2/\text{деление}$. Полученное по расчетным спектрам сечение при том же составе активной зоны ядерного реактора $^{\text{INR}}\sigma_f = (5.82 \pm 0.12) \times 10^{-43} \text{ см}^2/\text{деление}$. Для полученных спектров нет проблемы выпуклости спектра в области 5 МэВ в наблюдаемой энергии спектра позитронов.

1. L.A. Mikaelyan, in Proceedings of the International Conference “Neutrino-77” (Nauka, Moscow, 1978), Vol. 2, p. 383.
2. F. Reines and C.L. Cowan, Jr. Phys. Rev. 113, 273 (1959).
3. F. T. Avignone III and Z. D. Greenwood, Phys. Rev. C 22, 594 (1980).
4. Ю.В. Климов, В.И. Копейкин, А.А. Лабзов, Л.А. Микаэлян, К.В. Озеров, В.В. Синев, С.В. Толоконников, Измерение спектра электронных антинейтрино ядерного реактора// Ядерная физика, 1990. Т. 52. № 6. с. 1574–1582.
5. В.В. Синев, Определение спектров антинейтрино отдельно делящихся изотопов в прямом эксперименте на ядерном реакторе// Ядерная физика, 2009, том 72, № 11, с. 1906-1912.
6. H. de Kerret, T. Abrahaо, H. Almazan et al. (the Double Chooz Collaboration), Nature Physics, 16, 558, 2020.

Измерение поляризации Λ -гиперона в эксперименте СПАСЧАРМ

В.С. Темирбулатов¹, Д.В. Новинский¹

¹НИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ, г. Гатчина Ленинградской обл.

УДК: 539.124.4

Эксперимент СПАСЧАРМ (НИЦ КИ - ИФВЭ, г. Протвино) станет первым в мире, в котором открывается возможность одновременных измерений асимметрии A_N и поляризации P_N для Λ -гиперона [1]. Поляризация гиперонов измерялась ранее в нескольких экспериментах, был обнаружен неожиданный и большой эффект для разных гиперонов, что не объясняется большинством моделей. Сравнение указанных параметров для гиперонов открывает дополнительные возможности для выбора в пользу той или иной конкретной теоретической модели. В частности, рассматривается развиваемая в ИФВЭ феноменологическая модель хромагнитной поляризации кварков, которая претендует на глобальное объяснение поляризационных эффектов во взаимодействиях адронов [2].

Существующая установка позволяет проводить измерения в широком кинематическом диапазоне, то есть разделить кинематические переменные, от которых может зависеть асимметрия [3]. В большинстве других экспериментов такого разделения сделать невозможно из-за ограниченного акцептанса. Надежность получаемых результатов будет определяться самим методом и полным азимутальным углом. В таком случае строится зависимость разности сечений для разных знаков поляризации от косинуса азимутального угла. При этом минимизируются систематические ошибки, связанные с точностью мониторинга пучка.

1. Абрамов В.В. и др. Концептуальный проект эксперимента СПАСЧАРМ: Препринт НИЦ «Курчатовский институт» - ИФВЭ, 2019. - 145 с.
2. V.V. Abramov - Phys. Atom. Nucl. 72 (2009) 1872-1888; Part. Nucl. 45 (2014) 62-65.
3. С. И. Букреева и др. Распределенная система управления детекторами эксперимента СПАСЧАРМ / Приборы и техника эксперимента, 2019, № 2, стр. 12-18

Система диагностики пучков многозарядных ионов (МЗИ)

А.С. Фофанов¹, П.А. Шмидберский¹

¹Акционерное Общество «НИИЭФА им. Д.В. Ефремова», г. Санкт-Петербург

УДК: 53.08, 533, 539.1

Ионные пучки находят множество применений в различных технологиях, диагностики структур и изделиях микро- и наноэлектроники. В АО «НИИЭФА» проводятся работы, направленные на создание различных источников ионов и, в том числе, источников МЗИ [1], которые обладают свойствами, во многом отличающимися от пучков однозарядных ионов и нейтральных атомов [2]. Целью данной работы является высокоточное измерение параметров пучков МЗИ с учетом процессов, протекающих на сенсорах при взаимодействии их поверхности с МЗИ.

Для решения поставленных задач разработан диагностический комплекс, позволяющий измерять параметры пучков МЗИ в широком спектре масс. В составе такого комплекса реализованы основные классические методы диагностики ионных пучков с учетом особенностей пучков МЗИ. В качестве первичного преобразователя системы измерения величины тока ионного пучка разработан цилиндр Фарадея специальной конструкции, с минимальным током утечки возникающем в результате эффектов ион-электронной эмиссии и ионного распыления. В качестве вторичного преобразователя используется пикоамперметр А2-4, что в совокупности позволяет обеспечить высокую точность измерения. Измерение распределения плотности тока по сечению ионного пучка осуществляется методом диафрагмирования. Для измерения эмиттанса пучка МЗИ, в различных сечениях, и распределения плотности тока в четырёхмерном фазовом пространстве $J(x, y, x', y')$ используется метод четырех щелей.

Особое внимание было уделено анализу погрешностей измерений. Получены выражения для их оценки, учитывающие большинство влияющих факторов, по результатам анализа которых принят ряд конструктивных решений значительно повысивших точность измерений. Для исключения погрешностей, связанных с процессом измерения, используется система автоматического управления, для которой была разработана автоматизированная контрольно-измерительная система и соответствующие алгоритмы обработки информации. Разработан математический аппарат по обработке получаемой информации для определения эмиттанса и распределения плотности тока пучка в фазовом пространстве.

В результате разработан диагностический комплекс для высокоточных измерений параметров пучков МЗИ в широком спектре масс. Задачей дальнейших исследований является улучшение существующих и создания новых методов диагностики ионных пучков с субмикронной точностью.

1. Osina Y. et al. Cyclotron of Multicharged Ions // Proceedings of the 27th Russian Particle Accelerator Conference, RuPAC2021. Alushta, Russia: JACoW Publishing, Geneva, Switzerland, 2021. P. 3.

2. Zschornacka G., Schmidt M., Thorn A. Electron Beam Ion Sources. Senec, Slovakia: CERN Yellow Report, 2013. Vol. 007. P. 165–201.

Парное рождение тяжелых кваркониев в модели испарения цвета

А.А. Чернышев¹, В.А. Салеев¹

¹*Самарский национальный исследовательский университет, Самара
УДК: 539.1*

Экспериментальное исследование процессов рождения тяжелых кваркониев рассматривается, как один из самых важных тестов квантовой хромодинамики (КХД). Новый импульс к теоретическому исследованию физики тяжелых кварков, моделям адронизации кварков в адроны и обоснованию факторизации жестких процессов дало измерение сечений парного рождения чармониев и боттомониев коллаборациями LHCb, ATLAS и CMS на Большом адронном коллайдере [1,2,3]. В настоящее время выполнены расчеты парного рождения тяжелых кваркониев в коллинеарной партонной модели в рамках двух моделей адронизации: нерелятивистской КХД (НРКХД)[4] и испарения цвета[5]. В подходе кТ-факторизации (или факторизации при высоких энергиях) расчеты выполнены только в НРКХД [6]. В настоящей работе мы провели расчеты сечений парного рождения чармониев и боттомониев в модели испарения цвета в подходе кТ-факторизации, а именно в подходе реджезации партонов [7]. В качестве инструмента численных расчетов использовался Монте-Карло генератор партонного уровня KaTie [8] и полученные нами ранее неинтегрированные партонные функции распределения [9]. Расчеты проводились с учетом однопартонного и двухпартонного [10] механизмов рождения двух пар тяжелых кварков.

Самосогласованное описание экспериментальных данных по парному рождению тяжелых кваркониев достигается только при совместном учете однопартонного и двухпартонного механизмов рождения. При этом, например, параметр адронизации двух пар очарованных кварков и антикварков оказывается примерно равен параметру адронизации пары очарованный кварк – очарованный антикварк в чармоний, $F^{\psi} = F^{2\psi}$. В тоже время параметр, отвечающий за величину вклада двухпартонного рассеяния, оказывается примерно равным около $\sigma_{\text{eff}} = 10$ мбн, что хорошо согласуется с оценками этого параметра в других процессах.

Работа выполнена при поддержке Министерства высшего образования и науки Российской Федерации, проект FSSS-2020-0014.

1. LHCb Collaboration, R. Aaij et al. Measurement of the J/psi pair production cross-section in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV // JHEP.2017. V. 06. P. 047
2. ATLAS Collaboration, M. Aaboud et al. Measurement of the prompt J/psi pair production cross-section in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV with the ATLAS detector // Eur. Phys. J. 2017. V. C77. No. 2. P. 76
3. CMS Collaboration, V. Khachatryan et al. Measurement of prompt J/psi pair production in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV // JHEP 2014. V. 09. P. 094
4. Bodwin G.T., Braaten E., Lepage G.P. Rigorous QCD analysis of inclusive annihilation and production of heavy quarkonium // Phys. Rev. 1995. V. D51. P. 1125-1171
5. Ma Y.Q., Vogt R. Quarkonium Production in an Improved Color Evaporation Model // Phys. Rev. 2016. V. D94. No. 11. P. 114029
6. Lansberg J.P., Shao H.S., Yamanaka N, Zhang Y.J., C.~Nous C. Complete NLO QCD study of single- and double-quarkonium hadroproduction in the colour-evaporation model at the Tevatron and the LHC // Phys. Lett. 2020. V. B807. P. 135559
7. He Z.G., Kniehl B.A., Nefedov M.A., Saleev V.A. Double Prompt J/psi hadroproduction in the parton Reggeization approach with high-energy resummation // Phys. Rev. Lett. 2019 V. 123. No.16. P. 162002
8. Van Hameren A. KaTie : For parton-level event generation with k_T-dependent initial states // Comput. Phys. Commun. 2018 V. 224. P. 371-380
9. Nefedov M.A., Saleev V.A. High-energy factorization for Drell-Yan process in pp and p\bar{p} collisions with new unintegrated PDFs // Phys. Rev. 2020. V. D102. P. 114018
10. Ryskin M.G., Snigirev A.M. Double parton scattering in double logarithm approximation of perturbative QCD // Phys. Rev. 2012. V. D86. P. 014018

Рассеяние электронного пучка Эйри на атомных мишенях

Н.Е. Шеремет¹, Д.В.Гросман¹, И.И. Павлов¹, Д.В.Карловец¹

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, г. Санкт - Петербург
УДК: 539.171.016

Задача рассеяния электронов на потенциале известна давно, но до недавнего времени она была решена лишь для плоских волн [1]. Реальные пучки электронов имеют конечные размеры, поэтому их описание с помощью волновых пакетов является более точным. В настоящем исследовании речь идёт о пучках Эйри. Это негауссовы пучки, которые обладают необычными свойствами: они не дифрагируют, самовосстанавливаются и движутся по параболической траектории при отсутствии внешнего поля. Такие пучки широко применяются в оптической микроманипуляции частицами, для генерации оптических пульс, в биологии, квантовой информатике и др. Решение задачи рассеяния пучков Эйри даст возможность для создания новых методов их получения и нахождения новых приложений таких пучков.

Настоящая работа является продолжением работ по рассеянию Гауссовых [2] и Бесселевых [3] «закрученных» пучков на атомных мишенях. В процессе работы был использован аппарат квантовой нерелятивистской механики и оптики, а также методы численного моделирования. Сама работа выполнена в рамках обобщенного борновского приближения. В исследовании проведены вычисления числа событий пучка Эйри, рассеянного на модельной - макроскопической (бесконечной) и на более реальной – мезоскопической (конечного размера) мишенях, состоящих из потенциальных центров атома водорода. На этих примерах производилась оценка влияния различных параметров пучка Эйри, в том числе ширины и формы пакета, на процессы рассеяния.

Полученные результаты для электронного пучка Эйри отличаются от плосковолнового случая. При таком соотношении параметров, когда минимум плотности пучка попадает в центр мишени, ярко выражена азимутальная асимметрия картины рассеяния – наблюдается 4 максимума числа событий. Асимметрия оказывается очень чувствительной к прицельному параметру. Зависимость от ширины пакета также отслеживается: чем шире пакет, тем сложнее получить асимметричную картину рассеяния. При этом существует плосковолновой предел, при котором число событий распределено азимутально-симметрично.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ: «Взаимодействие закрученного света с отдельными атомами и атомными ансамблями». Номер соглашения: 21-4204412 от 11.11.2020.

1. Ландау Л. Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория // М.: Физматлит. 2004. Т. 3. 800 с.
2. Karlovets D. V. Scattering of wave packets on atoms in the Born approximation // Physical Review A. 2015. V. 92. No. 5. P. 052703.
3. Karlovets D. V. Scattering of twisted electron wave packets by atoms in the Born approximation // Physical Review A. 2017. V. 95, No. 3. P. 032703.

Методы измерения толщины входного окна полупроводниковых кремниевых детекторов

*Д.В. Иванов^{1,2}, Е.Ф. Бубнов^{1,2}, А.В. Дербин¹, И.С. Драчнев¹, И.М. Котина¹, М.С. Микулич¹,
В.Н. Муратова¹, Н.В. Ниязова¹, Д.А. Семёнов¹, М.В. Трушин¹, Е.В. Унжаков¹*

¹НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург

УДК: 539.1.074.55

Для экспериментов по поиску частиц тёмной материи необходим калибровочный источник нейтронов [1]. Нами разрабатывается источник на основе спонтанно делящегося изотопа ^{252}Cf , совмещённого с детектором. Кремниевые полупроводниковые детекторы обладают необходимыми характеристиками для регистрации осколков деления и α -частиц – тонким входным окном и хорошими временными и энергетическими разрешениями. Длительное облучение детектора источником ^{252}Cf приводит к изменению указанных параметров детектора, в частности, изменяется толщина нечувствительного слоя входного окна детектора [2, 3].

Цель работы состояла в сравнении двух методов определения толщины входного окна дрейфового Si(Li)- и поверхностно-барьерного детекторов. Первый метод основан на зависимости ионизационных потерь от энергии альфа-частицы [4], во втором – проводятся измерения при разных углах падения альфа-частиц на поверхность кристалла [5]. Для измерений использовался стандартный калибровочный «три-альфа» источник на основе изотопов ^{233}U , ^{238}Pu и ^{239}Pu . Регистрирующая аппаратура включала в себя зарядочувствительный предусилитель, спектрометрический усилитель и аналого-цифровой преобразователь в стандарте КАМАК. Измеренные спектры обрабатывались с использованием пакета ROOT.

В результате установлено, что чувствительность первого метода определяется разницей энергий наиболее отстоящих друг от друга альфа-пиков. Второй метод позволяет использовать альфа-пик с одной энергией, но требует измерения спектров при нескольких различных положениях альфа-источника и детектора. Полученные результаты для толщин входного окна согласуются в пределах ошибок, а разработанная методика измерений будет использована при создании компактного калибровочного источника нейтронов.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, проект №20-02-00571.

1. DarkSide-20k: A 20 tonne two-phase LAr TPC for direct dark matter detection at LNGS / C.E. Aalseth, F. Acerbi, P. Agnes, (...), A. Zullo, G. Zuzel // European Physical Journal Plus. – 2018. – V. 133: 131. doi: 10.1140/epjp/i2018-11973-4
2. Influence of α -particles irradiation on the properties and performance of silicon semiconductor detectors / S.V. Bakhlanov, N.V. Bazlov, I.D. Chernobrovkin, A.V. Derbin, I.S. Drachnev, I.M. Kotina, O.I. Konkov, A.M. Kuzmichev, M.S. Mikulich, V.N. Muratova, M.V. Trushin, E.V. Unzhakov // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V. 2103. – 012139. doi: 10.1088/1742-6596/2103/1/012139
3. Degradation of silicon detectors under long-term irradiation by ^{252}Cf fission products / S.V. Bakhlanov, A.V. Derbin, I.S. Drachnev, O.I. Konkov, I.M. Kotina, A.M. Kuzmichev, I.S. Lomsкая, M.S. Mikulich, V.N. Muratova, N.V. Niyazova, D.A. Semenov, M.V. Trushin, E.V. Unzhakov // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V. 2103. – 012138. doi: 10.1088/1742-6596/2103/1/012138
4. Многослойные полупроводниковые установки для спектроскопии заряженных частиц на ускорителях / Ю.Б. Гуров, С.В. Лапушкин, В.Г. Сандуковский, Б.А. Чернышев // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2018. Т. 49. Вып. 2. С. 476-581
5. Knoll, G.F. Radiation Detection and Measurement. 4th ed. Hoboken: Wiley, 2010. p. 803

Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии в изотопах калия

Е.А. Коновалова¹, Ю.А. Демидов^{1,2}

¹НИИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ, Гатчина.

²МГУ им. Ломоносова, Москва.

Магнитные моменты ядер короткоживущих изотопов калия можно извлечь из констант сверхтонкой структуры, измеренных экспериментально. Для точного определения ядерных магнитных моментов необходимо учесть сверхтонкую магнитную аномалию (СМА) – зависимость констант сверхтонкой структуры от размера ядра и от распределения намагниченности внутри ядра (поправки Брейта–Розенталь и Бора–Вайскопфа).

В работе поправка Бора–Вайскопфа представлена как произведение атомного и ядерного множителей [1]. Мы провели расчёты констант сверхтонкой структуры для основного и первого возбуждённого ($4s$ и $4p_{1/2}$) состояний калия. Показано, что поправки Брейта–Розенталь и Бора–Вайскопфа для $4p_{1/2}$ состояния пренебрежимо малы. Это позволило уточнить значения магнитных моментов короткоживущих изотопов калия из экспериментально измеренных констант $A(4p_{1/2})$ [2].

Также был выполнен расчёт атомного множителя к поправке Бора–Вайскопфа для основного состояния калия, что позволяет извлечь из экспериментальных данных ядерные вклады в поправки Бора–Вайскопфа ($d_{\text{нuc}}$). Ядерные множители могут быть вычислены с использованием одночастичной ядерной модели. Сравнение с $d_{\text{нuc}}$, полученными из экспериментальных данных, позволяет уточнить область применения одночастичной ядерной модели.

Особый интерес представляют ядерные множители для изотопов калия с ядерным спином $I = 3/2$, потому что они достигают больших значений и являются причиной больших сверхтонких магнитных аномалий. Ранее мы исследовали большие поправки Бора–Вайскопфа для изотопов $I = 3/2$ золота [3]. Исследование изотопов калия несёт дополнительную информацию о сингулярном поведении ядерных множителей для изотопов с одним валентным протоном на оболочке $d_{3/2}$.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 21-42-04411.

1. Е.А. Коновалова, Ю.А. Демидов, М.Г. Козлов, *Оптика и спектроскопия* 10, 1420 (2020).

2. J. Paruga, et al., *Phys. Rev. C* 90, 034321 (2014).

3. A. E. Varzakh et al., *Phys. Rev. C* 101, 034308 (2020).

Проектирование криогенной системы сверхпроводящего соленоида PANDA

А.Е. Орлова

Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

УДК: 53.07

Эксперимент PANDA является одним из ключевых проектов Европейского центра по исследованию физики антипротонов и ионов (FAIR), строящегося в настоящее время в Дармштадте (Германия). Физическая программа эксперимента PANDA покрывает широкое поле исследований, простирающихся от исследования фундаментальных проблем адронной и ядерной физики до проверки фундаментальных симметрий. Соленоид PANDA предназначен для обеспечения магнитного поля 2 Тл с однородностью $\pm 2\%$, запасенная энергия 21 МДж [1].

В изучении фундаментальных свойств материи важнейшим инструментом современной экспериментальной физики высоких энергий служат сверхпроводящие магниты. Широко применяемые в настоящее время проводники требуют низких температур для поддержания режима сверхпроводимости. Поэтому для создания сверхпроводящего магнита требуется эффективная и надежная криогенная система.

В данной работе приведены расчеты и анализ параметров криогенной системы сверхпроводящего соленоида PANDA. Представлен метод охлаждения и расчет тепловых нагрузок элементов криостата и распределительного бокса [2]. Разработаны схемы потоков для разных режимов работы [3]. Рассчитаны параметры охлаждения жидкого гелия в теплообменнике. На основании полученных данных приводится обоснование конструкции холодной массы и криостата соленоида PANDA [4].

Проделанная работа служит основой для разработки криогенной системы 1,5 Тл соленоида детектора Супер – Чарм – Тау фабрики и криогенной системы 1 Тл SPD соленоида ускорительного комплекса NICA.

1. Detailed Specification for the PANDA Superconducting Solenoid Magnet/ 2017 — 193 с.
2. Каганер М.Г., Тепловая изоляция в технике низких температур/ М. Г. Каганер — Москва: Машиностроение, 1966 — 275 с.
3. Плескач А.В., Способ расчета теплообменных контуров, работающих в термосифонном режиме/ А. В. Плескач — Протвино: ГНЦ РФ ИФВЭ, 1996 — 6 с.
4. Персов Б.З., Расчет и проектирование экспериментальных установок/ Б. З. Персов — Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004 — 348 с.

Диаграммы двухэлектронной собственной энергии для g -фактора литиеподобных ионов: калибровочная инвариантность

Е. В. Тряпицына^{1,2}, Д. А. Глазов^{1,2}, А. В. Волотка²

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Российская Федерация, Санкт-Петербург

²Университет ИТМО, Российская Федерация, Санкт-Петербург

УДК: 539.18

G -фактор ионов с малым числом электронов в последние годы вызывает большой интерес. Например, высокоточные измерения g -фактора [1,2,3] в сочетании с теоретическими разработками [2-5] обеспечили наиболее точное определение массы электрона [5] и наиболее строгую проверку эффектов КЭД и отдачи ядра в присутствии магнитного поля [2,3,5,6,7]. Перспективные направления исследований включают независимое определение константы тонкой структуры, точные измерения ядерных магнитных моментов и многое другое [4].

Современные теоретические расчёты g -фактора электрона в связанном состоянии включают строгий расчёт диаграмм КЭД первого и второго порядка. В частности, вклад диаграмм двухэлектронной собственной энергии в настоящее время рассматривается как возможная причина расхождения между теоретическими значениями g -фактора [8,9] и экспериментальными [2,7]. Один из возможных тестов для таких расчётов обеспечивается калибровочной инвариантностью суммарного вклада определенных наборов диаграмм. Метод соответствующего аналитического рассмотрения представлен в работе [10] для диаграмм двухфотонного обмена, результаты проверены численным расчётом. В данной работе мы исследуем зависимость вклада двухэлектронной собственной энергии в g -фактор связанного электрона от калибровки фотона, соответствующего межэлектронному взаимодействию. Аналитически идентифицируются калибровочно-инвариантные наборы диаграмм (всего 20 инвариантных наборов), затем эти результаты подтверждаются численным расчётом. Проверяется инвариантность суммарного вклада всех диаграмм, а затем и каждого вклада в отдельности. Важно, что так называемые прямой и обменный вклады оказываются калибровочно инвариантными отдельно друг от друга, причём прямые вклады оказываются инвариантны с машинной точностью.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 22-12-00258).

1. S. Sturm *et al.*, Phys. Rev. A **87**, 030501(R) (2013).
2. D.A. Glazov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **123**, 173001 (2019).
3. I. Arapoglou *et al.*, Phys. Rev. Lett. **122**, 253001 (2019).
4. V.M. Shabaev *et al.*, J. Phys. Chem. Ref. Data **44**, 031205 (2015).
5. V.P. Kosheleva *et al.*, Phys. Rev. Lett. **128**, 103001 (2022).
6. S. Sturm *et al.*, Nature **506**, 467 (2014).
7. F. Koehler *et al.*, Nature Communications **7**, 10246 (2016).
8. V.A. Yerokhin *et al.*, Phys. Rev. A **102**, 022815 (2020).
9. V.A. Yerokhin *et al.*, Phys. Rev. A **104**, 022814 (2021).
10. R.N. Soguel *et al.*, Phys. Rev. A **103**, 042818 (2021).

Анализ отношений дважды дифференциальных сечений рождения очарованных барионов во взаимодействиях протонов при $\sqrt{s} = 7$ и 8 ТэВ

В.В. Чуликов¹

¹НИИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина
УДК: 539.18

Ключевым в определении дифференциальных адронных сечений, является информация о процессе фрагментации, которую тяжело получить посредством моделирования, ввиду слабой предсказательной способности квантовой хромодинамики в области низких переданных импульсов. Изучение процесса фрагментации проводится экспериментально в процессах взаимодействия частиц высоких энергий, путем вычисления отношения сечений рождения изучаемого бариона к сечению рождению очарованного кварка, либо сумме дифференциальных сечений рождения адронов, распадающихся посредством слабого взаимодействия [1]. В настоящее время, в секторе очарованных частиц, мезонные функции фрагментации измерены с высокой точностью для D^0 , D^+ и D_s^+ мезонов и для их возбужденных состояний [2,3], в барионном секторе существует информация о функциях фрагментации двух основных состояний очарованных барионов: Λ_c^+ [3] и Ξ_c^+ [5].

В данном исследовании приводится измерение отношений функций фрагментации для двух возбужденных состояний очарованных барионов $\Xi_c(2645)^0$ и $\Xi_c(2815)^+$ к функции фрагментации основного состояния Ξ_c^+ . Исследование выполняется в нескольких кинематических интервалах (по скорости и поперечному импульсу бариона). Измерение выполнено с использованием данных о протон-протонных взаимодействиях, полученных в эксперименте LHCb в ходе экспериментального сеанса Run 1, при энергиях в системе центра масс 7 и 8 ТэВ. В рамках исследования выполнен учет энергетического разрешения детектора, также учтены статистические и систематические неопределенности.

1. Mykhailo Lisovyi, Andrii Verbytskyi, and Oleksandr Zenaiev. Combined analysis of charm-quark fragmentation-fraction measurements. *The Eur. Phys. J.* C76 (2016) 397.
2. ZEUS Collaboration. Measurement of D mesons Production in Deep Inelastic Scattering at HERA. *JHEP* 07 (2007) 074.
3. H1 Collaboration, A. Aktas et al. Inclusive Production of D^+ , D^0 , D_s^+ and D^{*+} Mesons in Deep Inelastic Scattering at HERA. *Eur. Phys. J.*, C38 (2005) 447.
4. LHCb Collaboration. Prompt charm production in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV. *Nucl. Phys. B* 871 (2013) 1.
5. ALICE Collaboration. Charm-quark fragmentation fractions and production cross section at 4 midrapidity in pp collisions at the LHC, *Phys. Rev. D* 105 (2022) L011103.

Теоретическое исследование адсорбционных свойств нихония

А.А. Шалаевский¹, Ю.А. Демидов^{1,2,3}

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

²НИИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина

³МГУ им. Ломоносова, Москва

УДК: 539.18

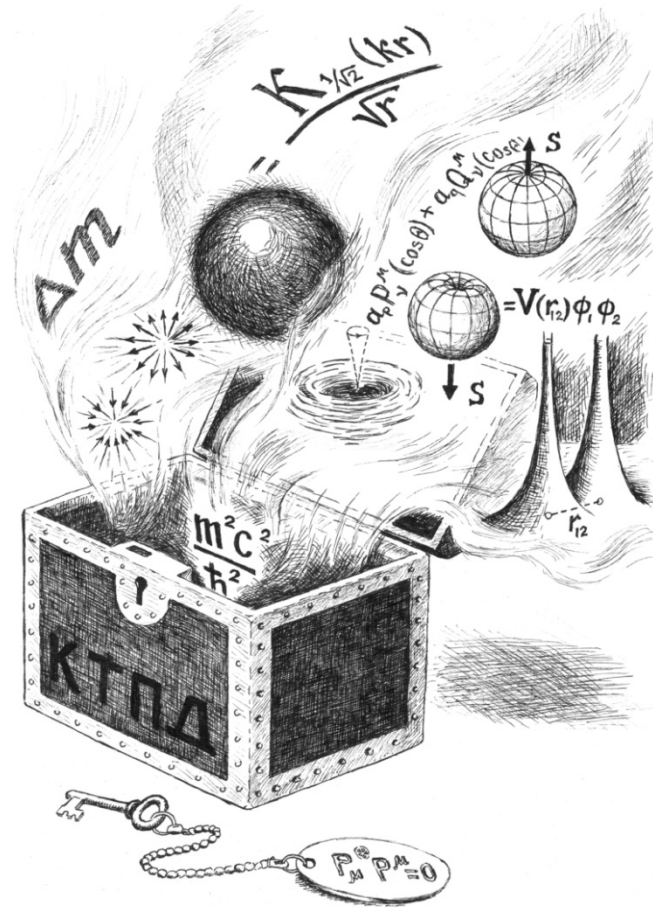
Время жизни некоторых изотопов сверхтяжелых элементов с зарядами ядер 112 и более позволяет исследовать их химические свойства методами газовой термохроматографии. После успешной идентификации по химическим свойствам Cn (элемента 112) и Fl (элемента 114) изучение химии Nh (элемента 113) наиболее интересно. Первые экспериментальные результаты о свойствах Nh получены в ОИЯИ (Дубна) [1]. Установлены ограничения на величины энтальпии адсорбции единичных атомов Nh на различных поверхностях. Также были выполнены модельные эксперименты с ближайшим гомологом Nh – Tl [2]. Корректная интерпретация экспериментальных данных осложняется тем, что и Nh, и Tl могут образовывать молекулярные соединения. В частности, активно обсуждается возможность образования NhOH, но используемые экспериментальные методы позволяют определить только наличие Nh в месте адсорбции из анализа цепочки α -распада. Недостающая информация может быть получена на основании моделирования этих процессов.

Ранее мы изучили свойства молекул гидроксидов Nh и Tl [3]. В данной работе мы исследовали электронную структуру адсорбционных комплексов Nh с кластерами золота. Мы использовали методы релятивистской теории функционала плотности в сочетании с релятивистскими псевдопотенциалами малого остова. На основании этих расчётов мы обсуждаем механизмы адсорбции Tl, Nh и молекул их гидроксидов на поверхности золота.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 21-42-04411.

1. Aksenov N.V. et al., *Eur. Phys. J. A* 53, 1 (2017).
2. Serov A. et al. *Radiochim. Acta* 101, 421 (2013).
3. Demidov Yu., Zaitsevskii A. *Chem. Phys. Lett.* 691,126 (2018).

Теоретическая физика



Естественная асимметрия контура спектральной линии

А.А. Аникин^{1,2}, Т.А. Залялютдинов^{1,3}, Д.А. Соловьев¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

²ВНИИМ им. Д.И. Менделеева, Санкт-Петербург

³НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

УДК: 539.18

Детальное изучение контура спектральной линии представляет собой важную задачу атомной физики, поскольку спектроскопические эксперименты, при теоретическом описании которых возникает данная задача, являются определяющими в самых разных областях физики. Впервые данная задача в рамках квантовой механики была представлена Вайскопфом и Вигнером [1]. В рамках же наиболее точной теории атомной физики - квантовой электродинамики (КЭД) - данная задача была рассмотрена впервые Ф.Лоу [2]. В своей работе Лоу также впервые использовал резонансное приближение, в рамках которого естественный контур спектральной линии имеет вид контура Лоренца, максимум которого соответствует резонансной частоте перехода. Однако, при современном уровне точности спектроскопических экспериментов - порядка 10^{-15} относительной величины в атоме водорода - необходимым становится учет нерезонансных (НР) эффектов, возникающих при выходе за рамки резонансного приближения.

Детальное изучение НР эффектов началось с работы [3], которая положило начало целому новому направлению исследований [4]. Одним из примеров НР эффектов является так называемый эффект квантовой интерференции, который возникает при учете переходов, близких к резонансному, что приводит к искажению естественного контура спектральной линии и возникновению соответствующих НР поправок к резонансной частоте перехода. Однако, существует другой тип НР эффектов, естественным образом возникающих при выводе контура спектральной линии, и имеющих место даже для “изолированного” энергетического уровня.

В резонансном приближении контур спектральной линии представляет собой симметричный контур Лоренца. Однако, в общем случае ширина линии является зависимой от частоты лазерного излучения, возбуждающего переход между энергетическими уровнями. Это приводит к тому, что спектральная линия описывается уже не контуром Лоренца, а более сложной функцией, максимум которой уже не будет соответствовать резонансной частоте, а будет сдвинут на величину соответствующей НР поправки [5,6]. Подобного рода НР поправкам, обусловленным естественной асимметрией контура линии, и посвящена данная работа.

Работа выполнена при поддержке грантом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”, а также грантом президента РФ № МК-4796.2022.1.2.

1. V.Weisskopf and E. Wigner, Berechnung der naturlichen linienbreite auf grund der diracschen lichttheorie // Zeitschrift fur Physik, vol. 63, pp. 5473, 1930.
2. F.Low, Natural line shape // Phys. Rev., vol. 88, pp. 5357, 1952.
3. L.Labzowsky, V. Karasiev, and I. Goidenko, Importance of the non-resonant corrections for the modern lamb shift measurements in the multicharged hydrogen-like ions // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, vol. 27, no. 15, p. L439, 1994.
4. A.Anikin, T.Zaliakiutdinov, D.Solovyev and L.Labzowsky, Line Profile Asymmetry In Precision Spectroscopy // arXiv.2204.1219.
5. L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien and G. Soff, Nonresonant corrections for the hydrogen atom // Canadian Journal of Physics, vol. 80, no. 11, pp. 11871194, 2002.
6. L. Labzowsky, D. Solovyev, G. Plunien and G. Soff, Nonresonant corrections to the 1s-2s two-photon resonance for the hydrogen atom // Phys.Rev. A, 65, 054502.

Приливные свойства многомерного пространства-времени Тангерлини

В.П. Вандеев, А.Н. Семенова

НИЦ «КИ» - ПИЯФ, Гатчина

Рассматривается уравнение девиации геодезических в случае свободного нерадиального движения в статичном сферически симметричном гравитационном поле массивной и электрически заряженной черной дыры произвольной размерности. Построен набор векторов, позволяющих обеспечить переход в систему отсчета, где уравнение девиации принимает диагональную форму, а ковариантная производная становится обыкновенной. Представлены выражения для пространственных компонент приливных сил в метрике Шварцшильда-Тангерлини аналогично работам [1] и [2] при произвольной размерности пространства-времени, а также учитывающих наличие углового момента L .

При нулевом угловом моменте уравнения девиации были решены явно при произвольной размерности пространства в виде квадратур. В некоторых размерностях эти квадратуры удалось выразить через эллиптические интегралы. При ненулевом угловом моменте были получены решения уравнений девиации геодезических в окрестности физической сингулярности в виде обобщенных степенных рядов. Это позволило обнаружить, что в главном порядке по радиальной переменной пробное тело, совершающее свободное движение в гравитационном поле, испытывает приливное растяжение тем более сильное, чем выше размерность пространства. Тогда как вдоль поперечных направлений интенсивность приливного сжатия, в главном порядке по радиальной переменной, не зависит от размерности пространства.

При сравнении решений уравнения девиации для радиальных и нерадиальных геодезических обнаруживается, что, как и в [3], при наличии углового момента в окрестности физической сингулярности пропадает приливное сжатие пробного тела вдоль азимутального направления, в то время как приливное растяжение вдоль радиального направления усиливается. При наличии электрического заряда исследуемой черной дыры все качественные характеристики приливных сил и поведение их пространственных компонент остаются такими же, меняются лишь количественные характеристики решений вследствие того, что слагаемое, содержащее электрический заряд, имеет полюс второго порядка в отличие от слагаемого с массовым членом в метрике.

1. Fush H. *Ann. Physik, Solutions of the Equations of geodesic Deviation for static spherical symmetric space-time* // 495, 231-233 (1983).
2. Vandejev, V.P., Semenova, *Tidal forces in Kottler spacetimes* // *A.N. Eur. Phys. J. C* **81**, 610 (2021).
3. Vandejev, V.P., Semenova, *Deviation of non-radial geodesics in a static spherically symmetric spacetime* // *A.N. Eur. Phys. J. Plus* **137**, 185 (2022).

**g-фактор многозарядных Li-подобных ионов:
корреляционные эффекты в нерелятивистском пределе**

А. Д. Мошкин¹

¹Физический факультет СПбГУ, Ульяновская 1, Петергоф, 198504 Санкт-Петербург
УДК: 530.145.7, 539.183.4, 539.184.28

За последние десятилетия были получены значительные результаты в изучении g-фактора многозарядных ионов [1,2]. Последние эксперименты достигли точности до 10^{-9} — 10^{-11} для H-подобных, Li-подобных и В-подобных ионов [3-7]. Благодаря этим исследованиям были получены наиболее точные значения массы электрона [8]. Кроме этого, измеряя g-фактор лёгких и тяжёлых многозарядных ионов, можно определять значение постоянной тонкой структуры, определять параметры ядер и искать проявления новой физики [2, 9-11]. Не так давно в институте им. Макса Планка в ходе проекта ALPHATRAP был измерен g-фактор основного состояния бороподобного аргона с точностью 10^{-9} и эти данные согласуются с теоретическими [6]. В рамках этого проекта в дальнейшем планируются эксперименты с более тяжёлыми ионами с различным числом электронов. В данной работе исследуются корреляционные эффекты при малых значениях заряда ядра для кулоновского и различных экранирующих потенциалов. Поправки на межэлектронное взаимодействие в приближении Брейта раскладываются по степеням параметра αZ для литиеподобных ионов. В комбинации с высокоточными нерелятивистскими расчётами это позволит улучшить точность теоретических значений.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 22-12-00258).

1. S. Sturm *et al.*, *Atoms* **5**, 4 (2017).
2. V. M. Shabaev *et al.*, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **44**, 031205 (2015).
3. S. Sturm *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 023002 (2011).
4. A. Wagner *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 033003 (2013).
5. F. Köhler *et al.*, *Nat. Commun.* **7**, 10246 (2016).
6. I. Arapoglou *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 253001 (2019).
7. D. A. Glazov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 173001 (2019).
8. S. Sturm *et al.*, *Nature* **506**, 467 (2014).
9. V. M. Shabaev *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 253002 (2006).
10. V. A. Yerokhin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 100801 (2016).
11. V. Debierre *et al.*, *Phys. Lett. B* **807**, 135527 (2020).

Динамический диамагнетизм в легко-плоскостном антиферромагнетике в наклонном магнитном поле

А.С. Щербаков¹, О.И. Утесов^{1,2,3}

1. НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина
2. Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург
3. Санкт-Петербургская школа физико-математических и компьютерных наук, НИУ «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург

Соединения DTN [NiCl₂-4SC(NH₂)₂] и его допированный бромом (с заменой атомов хлора на атомы брома) аналог DTNX [1,2] изучались в течение последних нескольких десятилетий в основном в контексте квантовых фазовых переходов как в отсутствие беспорядка, так и при его наличии. Эти вещества можно рассматривать как слабосвязанные антиферромагнитные (АФ) цепочки со спином S=1 с сильной одноионной анизотропией типа легкая плоскость.

В нашей предыдущей работе [3] объяснялись немонотонная зависимость щели в спектре в упорядоченной фазе от величины внешнего магнитного поля и констант обменного взаимодействия в рамках обычного диаграммного стандартного 1/S разложения, где подчеркивалась важная роль сильных квантовых флуктуаций.

В настоящей статье мы продолжаем теоретическое обсуждение работы [3]. Здесь мы рассматриваем случай наклонного магнитного поля, исследовавшийся экспериментально [4]. Используя формализм Кубо для линейного отклика и 1/S разложение было показано, что индуцируемая наклонным полем поперечная компонента восприимчивости приобретает сингулярность вблизи частоты “Квазиголдтоуновского” магнона из-за сильных квантовых поправок, в первом порядке 1/S разложения. Это приводит к экспериментально наблюдаемой полевой зависимости щели в акустической ветви спектра. Показано, что оптическая ветвь вблизи центра упорядоченной фазы приобретает значительное затухание за счет двухмагнонных процессов. Таким образом, наша теория количественно поддерживает качественное обсуждение явления динамического диамагнетизма, наблюдаемое в экспериментах [3].

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых ученых – кандидатов наук МК-1366.2021.1.2.

1. K. Yu. Povarov, E. Wulf, D. Hüvonen, J. Ollivier, A. Paduan-Filho, and A. Zheludev Phys. Rev. B 92, 024429, 2015.
2. Zvyagin S. A. et al. Spin dynamics of NiCl₂-4SC(NH₂)₂ in the field-induced ordered phase Physical Review B. – 2008. – Т. 77. – №. 9. – С. 092413.
3. T. A. Soldatov, A. I. Smirnov, K. Yu. Povarov, A. Paduan-Filho, and A. Zheludev Phys. Rev. B 101, 104410.
4. Sherbakov A. S., Utesov O. I. Magnon spectrum and electron spin resonance in antiferromagnet with large single-ion easy plane anisotropy Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2021. – Т. 518. – С. 167390.

Дробовой шум в одноканальных интерферометрах Ааронова-Бома

Ниязов Р.А.^{1,2}, Крайнов И.В.³, Аристов Д.Н.^{2,1}, Качоровский В.Ю.³

¹СПбГУ, Санкт-Петербург

²НИЦ КИ - ПИЯФ, Гатчина

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

УДК: 537.9

Дробовой шум является следствием дискретности переносчика заряда и выражается через усреднение по ансамблю частиц от квадрата отклонения тока от величины среднего тока. Его измерение можно использовать для получения информации, недоступной из измерений кондактанса: определить заряд и статистику переносчиков тока и внутренние энергетические масштабы системы [1]. Можно исследовать фактор Фано F , который является отношением шума к току. Например, для диффузионного проводника значение $F=1/3$ универсально – не зависит от формы, длины и кондактанса проводника.

Данное исследование направлено на теоретическое изучение зависимости фактора Фано одноканальных интерферометров Ааронова-Бома от магнитного поля [2]. Был вычислен фактор Фано для «обычного» материала. В этом случае электрон может рассеиваться в местах контактов, подведенных к интерферометру, что приводит к появлению интерференции. Зависимость фактора Фано от магнитного потока в единицах кванта потока имеет пик в полужелтых значениях при симметричных плечах интерферометра и два пика при их отличии.

Исследование выполнено за счет гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (проект № МК-2918.2022.1.2) (Н.Р.А.) и при финансовой поддержке РФФИ грант № 20-12-00147 (А.Д.Н., К.В.Ю.).

1. Blanter Y., Büttiker, M. Shot noise in mesoscopic conductors // Physics Report. 2000. V. 336. P. 1-166.
2. Shmakov P. M., Dmitriev A. P., Kachorovskii, V. Y. Aharonov-Bohm conductance of a disordered single-channel quantum ring // Physical Review B. 2013. V. 87. P. 235417.

О влиянии точечных дефектов на свойства тонких пленок с интерфейсным взаимодействием Дзялошинского-Мория

О.И. Утесов^{1,2,3}, А.В. Сыромятников²

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

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

³Санкт-Петербургская школа физико-математических и компьютерных наук, НИУ «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург

УДК: 537.9, 537.611

Антисимметричное обменное взаимодействие, известное как взаимодействие Дзялошинского-Мория, возникает при отсутствии центра инверсии между магнитными ионами. Такая ситуация, в частности, типична для интерфейсов, разделяющих магнитный и немагнитный материал. В этом случае говорят об интерфейсном взаимодействии Дзялошинского-Мория (ИВДМ) [1].

При нулевой температуре и наличии внешнего магнитного поля в системах с ИВДМ помимо полностью поляризованной фазы, могут быть стабильными магнитные циклоиды и неелевские скирмионы. Последние считаются перспективными с прикладной точки зрения. Рассматриваются их возможные применения как носителей информации в спинтронике [2]. При ненулевой температуре, в силу теоремы Мермина-Вагнера, существование неколлинеарных фаз с дальним порядком запрещено. Однако при достаточно низких температурах соответствующая корреляционная длина может быть большой по сравнению с характерным масштабом длины в системе – периодом циклоиды.

Хорошо известно, что идеальных интерфейсов в природе не существует. Можно ожидать, что на границе раздела тонкой пленки магнитного материала и тяжелого металла будет значительное количество точечных дефектов, например, вакансий или межузельных атомов. С точки зрения магнитной подсистемы эти эффекты можно моделировать с помощью дефектных связей и отсутствия ионов в некоторых узлах решетки. В данной работе соответствующая модель исследуется теоретически.

В недавней статье [3] модель беспорядка в связях была применена к двумерному фрустрированному неколлинеарному магнетизму. Авторы обнаружили, что одиночный дефект создает искажение магнитного порядка, описываемое выражением для поля диполя (ранее подобное решение в трехмерной неколлинеарной системе было найдено в статье [4]) в двумерном пространстве. При сколь угодно малой концентрации таких дефектов дальний порядок в системе оказывается разрушенным за счет дальнедействующего характера искажений. Схожие эффекты обсуждаются и в исследуемой в данной работе модели. Однако, как было показано, процессы переброса, возникающие за счет ИВДМ, приводят к существенной перестройке спектра длинноволновых магнонов и статической восприимчивости. Таким образом, на больших масштабах длин (по сравнению с периодом циклоиды) свойства системы претерпевают значительные изменения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-22-00028).

1. Fert A., Levy P.M. Role of anisotropic exchange interactions in determining the properties of spin glasses // *Physical Review Letters*. 1980. V. 44. P. 1538–1541.
2. Fert A., Cros V., and Sampaio J. Skyrmions on the track // *Nature Nanotechnology*. 2013. V. 8. P. 152–156.
3. Dey S., Andrade E.C., and Vojta M. Destruction of long-range order in noncollinear two-dimensional antiferromagnets by random-bond disorder // *Physical Review B*. 2020. V. 101. P. 020411(R).
4. Utesov O.I., Sizanov A.V., and Syromyatnikov A.V. Spiral magnets with Dzyaloshinskii-Moriya interaction containing defect bonds // *Physical Review B*. 2015. V. 92. P. 125110.

Конкуренция между квадратной и гексагональной скирмионными решетками в слоистых нецентросимметричных магнетиках

О.И. Умцов^{1,2,3}

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

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

³Санкт-Петербургская школа физико-математических и компьютерных наук, НИУ «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург

УДК: 537.9, 537.611

Одиночные скирмионы [1] и их упорядоченные массивы – скирмионные решетки [2] – являются одной из наиболее активно исследуемых тем в физике конденсированных сред с момента первого экспериментального обнаружения скирмионной решетки в виде гексагональной плотной упаковки скирмионов в MnSi [3]. Важно, что они вызывают не только фундаментальный интерес, но и считаются перспективными с прикладной точки зрения. Например, была предложена схема запоминающего устройства, использующего скирмионы в качестве носителей информации [4].

На данный момент хорошо известно, что топологически-нетривиальные спиновые структуры могут быть (мета)стабильными как в магнетиках без центра инверсии (за счет взаимодействия Дзялошинского-Мория), так и во фрустрированных неколлинеарных системах. Существует огромное количество работ с соответствующими экспериментами, однако теоретические исследования зачастую несут численный характер, что делает их предсказания сложными для непосредственного использования на практике. Причиной этому служит необходимость выполнения принципа сохранения модуля в скирмионных фазах, существенно усложняющая расчеты. Исключением является высокотемпературная область фазовой диаграммы (вблизи температуры перехода в парамагнитную фазу), где усредненное по термодинамическим флуктуациям значение величины спина много меньше насыщенного. В этом случае, расчеты в рамках приближения среднего поля (разложения Ландау) становятся достаточно простыми и наглядными.

В данной работе исследована высокотемпературная часть фазовой диаграммы слоистых неколлинеарных магнетиков. Важную роль при этом играет разрешенная симметрией одноионная анизотропия. Умеренное магнитное поле вдоль высокосимметричного направления стандартным образом стабилизирует гексагональную (с тремя векторами модуляции под углом 120 градусов) плотную упаковку скирмионов (блоховских или неелевских, в зависимости от симметрии системы) за счет нелинейного члена в свободной энергии. Однако при анизотропии типа «легкая плоскость» достаточной силы возникает интересный эффект – даже при слабом внешнем поле квадратная скирмионная решетка оказывается более выгодной, чем структуры с одним (спираль или циклоида) или тремя (гексагональная скирмионная решетка) векторами модуляции.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых ученых – кандидатов наук МК-1366.2021.1.2.

5. Bogdanov A.N., Yablonskii D.A. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets // *Zh. Eksp. Teor. Phys.* 1989. V. 85. P. 178–182.
6. Bogdanov A., Hubert A. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 1994. V. 138. P. 255–269.
7. Muhlbauer S., et al. Skyrmion lattice in chiral magnet // *Science.* 2009. V. 323. P. 915.
8. Fert A., Cros V., and Sampaio J. Skyrmions on the track // *Nature Nanotechnology.* 2013. V. 8. P. 152–156.

Calculations of singly excited states in a helium-like uranium ion

N. K. Dulaev^{1,2}

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

²*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина*

УДК: 53.01

Study of the electronic structure of highly charged ions provides a unique opportunity for testing theoretical predictions of quantum electrodynamics (QED) in strong fields [1]. Precise theoretical predictions for energy levels of highly charged ions are widely used in study of spectra from high-temperature astrophysical sources, thermonuclear fusion reactor, and laser-produced plasmas. Heliumlike ions are especially attractive systems for investigation, since these ions can be described theoretically with very high accuracy [2, 3, 4].

In the last decades, experiments aimed to probe QED effects with highly charged ions achieved great accuracy: the ground state Lamb shift in H-like uranium was measured with uncertainty of a few percent [5]. To meet accuracy of the existing and planned experiments, theoretical calculations taking into account QED effects are required. Moreover, calculations of transition probabilities are needed to analyze experimental data.

In the present work a theoretical analysis of the electronic structure of He-like uranium is performed. Energy levels of singly excited states $1sns$, $1snp$, $1snd$, $n \leq 4$ are calculated within the Breit approximation using the configuration-interaction method in the basis of the Dirac-Fock-Sturm orbitals. The QED corrections are calculated using the model-QED-operator method. The mass shift and frequency-dependent Breit-interaction corrections are taken into account as well. The uncertainty due to the inter-electronic interaction is estimated to be about 0.01-0.10 eV. In addition, for transitions $1s3d \rightarrow 1s2p$, $1s3p \rightarrow 1s2s$, $1s3p \rightarrow 1s2p$, $1s3p \rightarrow 1s2s$, $1s4d \rightarrow 1s2p$, the transition probabilities are calculated.

1. Shabaev V. M. et al. // *Hyperfine Interactions*. 2018. V. 239. No. 1.
2. Kozhedub Y. S. et al. // *Phys. Rev. A*. 2019. V. 100. No. 6.
3. Yerokhin V. A. and Surzhykov A. // *Journal of Phys. and Chem. Ref. Data*. 2019. V. 48. No. 3.
4. Malyshev A. V. et al. // *Phys. Rev. A*. 2019. V. 99. No. 1.
5. Gumberidze A. et al. // *Phys. Rev. Letters*. 2005. V. 94. No. 22.

Дробовой шум в геликоидальных интерферометрах Ааронова-Бома

Ниязов Р.А.^{1,2}, Аристов Д.Н.^{2,1}, Качоровский В.Ю.³

¹СПбГУ, Санкт-Петербург

²НИЦ КИ - ПИЯФ, Гатчина

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

УДК: 537.9

Последнее время активно исследуются двухмерные топологические изоляторы (2D ТИ). Они являются диэлектриками в объеме, но на краю могут содержать проводящие геликоидальные электронные состояния. Благодаря этому 2D ТИ естественным образом являются квантовыми интерферометрами, если присоединить к ним металлические электроды. При этом рассеяние электронов в местах их контакта отсутствует, и интерференция возникает только при наличии магнитного дефекта на краю образца.

Однако, проведенные исследования обсуждают в основном величины связанные со средним значением тока – кондактанс и спиновую поляризацию [1]. Известно, что этого недостаточно для получения полной информации о квантовых эффектах в транспорте электронов [2]. Так, дробовой шум является следствием дискретности переносчика заряда и выражается через усреднение по ансамблю частиц от квадрата отклонения тока от величины среднего тока. Его измерение можно использовать для получения информации, недоступной из измерений кондактанса: определить заряд и статистику переносчиков тока и внутренние энергетические масштабы системы.

Из измерения шума можно получить фактор Фано F , который является отношением шума к току. Его экспериментальное измерение для краевых состояний 2D ТИ дает значение $F=0.29$, что до сих пор не имеет под собой достаточно хорошего объяснения [3]. Насколько нам известно, измерения зависимости фактора Фано от магнитного поля в таких системах, как и их теоретические оценки, не проводились. На исправление этой ситуации направлено текущее исследование: вычислен дробовой шум в 2D ТИ, проведен анализ полученного выражения и его зависимости от магнитного потока, пронизывающего образец. Показано, что относительная длина плечей интерферометра не влияет на интерференцию, а при полужелтых значениях потока возникают антирезонансы.

Исследование выполнено за счет гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (проект № МК-2918.2022.1.2) (Н.Р.А.) и при финансовой поддержке РФФИ грант № 20-12-00147 (А.Д.Н., К.В.Ю.).

1. Niyazov R. A., Aristov D. N., Kachorovskii, V. Y. Aharonov–Bohm Interferometry Based on Helical Edge States (Brief Review) // JETP Letters. 2021. V. 113. P. 689-700.

2. Nazarov, Y. V., Blanter, Y. M. *Quantum Transport*. Cambridge University Press. 2009.

3. Piatrusha S. U. et al. Noise Insights into Electronic Transport // JETP Letters. 2018. V. 108. P. 71-83.

Calculations of the two-potential contribution to the self-energy diagram

E. A. Prokhorchuk

Saint Petersburg State University, Saint Petersburg

УДК: 53.01

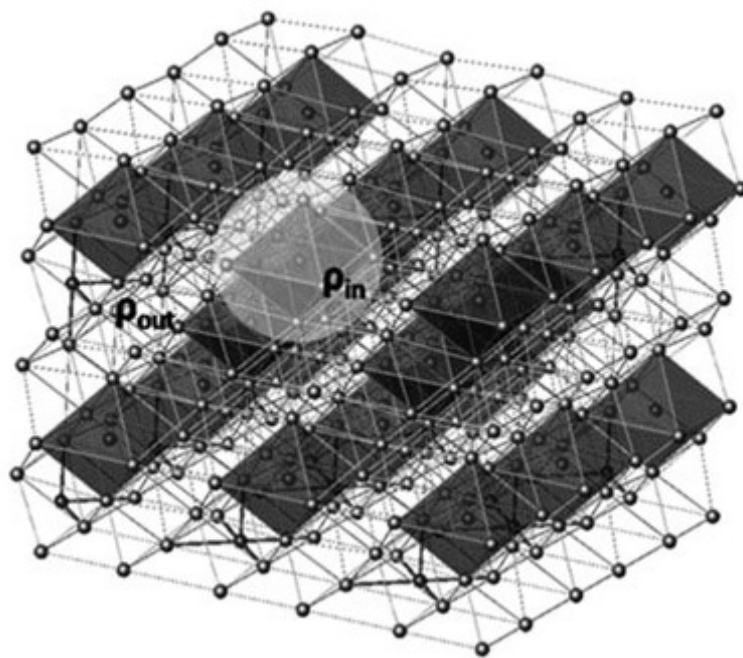
Recent experiments aimed to study various properties of highly charged ions allow testing the predictions of quantum electrodynamics (QED). For instance, high-precision measurements of the bound-electron g factor give the value with uncertainty of about 10^{-11} [1]. In order to make theoretical predictions with accuracy comparable or greater than experimental one, QED effects are required to be included into the calculations.

In particular, one of the leading QED effects to energy levels, g factors and other atomic properties is given by the self-energy correction. Calculations for highly charged ions have to be done to all orders in the electron-nucleus coupling. Theoretical uncertainty is mainly due to a slow convergence of partial-wave decompositions, see, e.g., refs. [2, 3]. To improve the accuracy of theoretical calculations, in present work another approach is considered, where the slowly converging contribution is evaluated separately [4].

In present work, the electron Green's functions with one and two interactions with external field are studied. The potentials of a general form, which do not conserve the angular quantum numbers, are considered and used to evaluate the radial Green's functions. Obtained formulas are planned to be employed in the calculations of the one- and two-electron self-energy corrections. In addition, in the present work the self-energy corrections to the energy levels of $n=1$ and $n=2$ states in hydrogen-like calcium are calculated, and two calculation schemes are compared.

1. H. Häffner et al. // *Phys. Rev. Lett.*, 85:5308–5311, 2000.
2. V. A. Yerokhin et al. // *Phys. Rev. A*, 60:800–811, 1999.
3. V. A. Yerokhin et al. // *Phys. Rev. A*, 69:052503, 2004.
4. A. N. Artemyev et al. // *Phys. Rev. A*, 88:032518, 2013.

Физика конденсированного состояния



Локально-неоднородные упругие свойства аморфных материалов

Д.А. Конюх¹, А.А. Семенов¹, Я.М. Бельтюков¹

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

УДК: 538.951, 539.21

Понимание физических процессов, определяющих свойства аморфных материалов в стеклообразном состоянии, является важной проблемой физики конденсированных сред. Отличительной особенностью аморфных веществ является отсутствие порядка в расположении их структурных элементов на микроскопическом уровне. Это приводит к целому ряду уникальных явлений, наблюдаемых, в том числе, в неоднородных упругих свойствах аморфных, полимерных и нанокомпозитных сред. К этим свойствам относится появление так называемых неаффинных деформаций при приложении к структуре однородного внешнего воздействия [1]. С теоретической точки зрения изучение неаффинных деформаций является одной из востребованных задач, поскольку упругие свойства веществ в стеклообразном состоянии играют важную роль во многих областях человеческой деятельности.

Характерный масштаб неаффинных деформаций зависит от силы беспорядка и может составлять несколько нанометров [1]. На этих масштабах локально однородная теория упругости неприменима. Поэтому для изучения природы неаффинных деформаций можно рассматривать упругие свойства нанокомпозитных объектов с размерами структурных элементов, сопоставимых с масштабом неаффинных деформаций. Экспериментально установлено, что добавление включений нанометрового размера может сильнее влиять на макроскопические свойства нанокомпозитов по сравнению с добавлением включений большего размера при той же объемной доле [2]. Также неаффинные деформации играют важную роль в комплексных материалах со слоистой структурой вблизи границы аморфных и кристаллических слоев. Такие структуры могут образовываться, например, в процессе роста полупроводниковых материалов.

Для изучения неаффинных деформаций в аморфных твердых телах нами были применены теоретические подходы, такие как метод анализа локальной флуктуации плотности вещества и некоторые методы теории случайных матриц [3, 4, 5]. Проведенные с помощью этих методов исследования позволяют говорить о том, что неупорядоченные структуры с наночастицами обладают необычными упругими свойствами по сравнению с их кристаллическими аналогами. Результаты наших исследований показывают, что вокруг наночастицы образуется эффективная упругая оболочка с толщиной порядка масштаба неаффинных деформаций [3]. Такая оболочка увеличивает эффективный объем наночастиц, что ведет к увеличению их влияния на макроскопические упругие свойства нанокомпозитов. Наблюдается экспоненциальный спад упругих модулей вблизи жесткой наночастицы в зависимости от расстояния до нее [4]. Аналогичное поведение упругих модулей наблюдается и вблизи перехода между аморфными и кристаллическими слоистыми структурами, что является проявлением неоднородности локальных деформаций [5].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-72-10083.

1. Leonforte F. et al. Continuum limit of amorphous elastic bodies. III. Three-dimensional systems // *Physical Review B*. 2005. V. 72. No. 22. P. 224206.
2. Москалюк О.А. и др. Механические свойства полимерных композитов с наночастицами диоксида кремния // *Журнал технической физики*. 2017. Т. 87. № 2. С. 266-270.
3. Конюх Д.А., Бельтюков Я.М., Паршин Д.А. Влияние наночастиц на макроскопическую жесткость аморфных тел // *Физика твердого тела*. 2019. Т. 61. № 7. С. 1331-1335.
4. Beltukov Y.M., Conyuh D.A., Solov'yov I.A. Local elastic properties of polystyrene nanocomposites increase significantly due to nonaffine deformations // *Physical Review E*. 2022. V. 105. No. 1. P. L012501.
5. Семенов А.А., Конюх Д.А., Бельтюков Я.М. Неаффинные деформации и локальные упругие свойства аморфных наноструктур // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64. № 8. С. 1039-1045.

Релаксационные процессы при флексоэлектрическом эффекте в монокристаллах SrTiO₃ (Устный доклад)

Е.Д. Обозова, В.Г. Залесский

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург

УДК: 537.226.4

Флексоэлектрическим эффектом называется электромеханический эффект, при котором устанавливается взаимная связь между поляризацией и неоднородной деформацией диэлектрических и полупроводниковых кристаллов [1]. Эффект мал, но значительно возрастает при переходе к объектам микро- и наноскопического масштаба (тонкие пластины, пленки и т.д.) и способен конкурировать по электромеханической эффективности с пьезоэлектричеством. Поэтому исследование этого явления вызывает интерес, как в теоретическом, так и в прикладном аспекте. Одной из главных задач в области флексоэлектричества является определение величин флексоэлектрических тензоров на основании теоретических расчетов и экспериментальных измерений [1]. Для многих известных активных диэлектриков были проведены расчеты тензоров и, в большинстве случаев, между рассчитанными и измеренными величинами наблюдается расхождение вплоть до нескольких порядков [2]. Причина расхождения может быть обусловлена наличием релаксационных и гистерезисных явлений, например, за счет транспорта и перераспределения носителей заряда (электронов, ионов или кислородных вакансий) в объеме кристалла [3], а также за счет механической пластичности кристаллов.

В работе представлены результаты исследования прямого и обратного флексоэлектрического эффекта в тонких (~100 μm) и толстых (~1 mm) монокристаллических пластинках сегнетоэлектриков в кубической фазе SrTiO₃ (ST). При исследовании прямого эффекта измерялась поляризация, индуцированная деформацией сферического изгиба тонких пластин, а также использовалась локальная деформация иглообразным зондом поверхности толстой пластины. В случае обратного эффекта измерялся деформационный отклик тонкой пластины на воздействие внешнего электрического поля. В настоящей работе основной акцент сделан на исследовании природы релаксационных явлений, сопровождающих флексоэлектрический эффект.

В результате получены характерные времена релаксации: 1) Релаксация механического напряжения за счет пластичности образцов: $\tau \sim 1.3$ и 12 с; 2) Релаксация индуцированной поляризации при прямом эффекте: $\tau \sim 0.06$ и 1 с; 3) Релаксация индуцированной деформации при обратном эффекте: $\tau \sim 5, 9$ с. Показано, что полученные времена релаксации флексоэлектрического отклика коррелируют с временами релаксации диэлектрического отклика после облучения кристалла лазерным излучением с длиной волны 0.532 nm. Обсуждается механизмы релаксационных процессов, возникающих при флексоэлектрическом эффекте, связанные с транспортом и перераспределением носителей заряда в объеме кристалла.

1. Tagantsev A.K., Yudin P.V.. Flexoelectricity in solids // Singapore: World Scientific Publishing Co. 2017. P. 396.
2. Zubko P., Catalan G., Tagantsev A.. Flexoelectric Effect in Solids // Annu. Rev. Mater. Res. 2013. V. 43. P. 387-421.
3. Morozovska A.N., Eliseev E.A., Svechnikov G.S., and Kalinin S.V.. Nanoscale electromechanics of paraelectric materials with mobile charges: Size effects and nonlinearity of electromechanical response of SrTiO₃ films // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 045402.

Исследование возможности регистрации осколков спонтанного деления ^{252}Cf при помощи двустороннего Si(Li)-детектора

Е.Ф. Бубнов¹, А.В. Дербин¹, И.М. Котина¹, М.В. Трушин¹

¹НИИ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

УДК: 3937, 538.9, 539.1

Работа посвящена исследованию возможности применения двустороннего тонкооконного Si(Li)-детектора для регистрации осколков деления изотопа ^{252}Cf . Данный радионуклид претерпевает α -распад и спонтанное деление с образованием двух осколков и 3-4 нейтронов. Максимумы энергии более тяжёлых осколков находятся в интервале от 40 до 95 МэВ, а лёгких от 100 до 130 МэВ.

Измерения проводились на установке, состоящей из детектора и источника, помещённых в вакуумную камеру, зарядочувствительного преусилителя, спектрометрического усилителя и аналого-цифрового преобразователя в стандарте КАМАК. В нашей лаборатории был изготовлен Si(Li)-детектор с тонким входным окном как со стороны р-, так и со стороны n^+ -контакта [1]. Для проверки возможности детектирования он последовательно облучался осколками спонтанного деления ^{252}Cf с двух сторон. Мы подтвердили возможность регистрации короткопробежных осколков деления Si(Li)-детектором, как со стороны р(палладиевого)-слоя, так и со стороны п(литиевого)-слоя. Измерения показали, что с ростом напряжения смещения на Si(Li)-детекторе, ширина входного окна детектора уменьшается, что приводит к изменению регистрируемого спектра альфа-частиц и осколков деления. При подаче на детектор различного напряжения, было измерено смещение пиков осколков деления, позволившее определить изменение толщины входного окна со стороны Pd- и Li-слоя. На конференции будут показаны зависимости потери энергии в «мёртвом слое» детектора от приложенного напряжения смещения для лёгких и тяжёлых осколков деления для обеих сторон детектора и представлена рассчитанная зависимость изменения ширины входного окна детектора.

Для получения данных по пробегу осколков деления и пространственному распределению электронно-дырочных пар лёгкими и тяжёлыми осколками было проведено моделирование в программе «SRIM» [2]. Для моделирования были выбраны осколки ^{106}Ag и ^{143}Nd , имеющие наиболее вероятный выход. Симуляция позволила определить максимально возможную толщину входного окна, при которой все осколки будут зарегистрированы в чувствительном объеме детектора. Актуальность создания детекторов с двусторонними тонкими окнами поддерживается возможностями годоскопов для регистрации длиннопробежных частиц [3].

1. Si(Li) detector with ultra-thin entrance window on the diffusive lithium side / N. V. Bazlov , A. V. Derbin , I. S. Drachnev , G. E. Gicharevich , I. M. Kotina , O. I. Konkov , N. V. Pilipenko , E. A. Chmel , S. N. Abolmasov , E. I. Terukov , E. V. Unzhakov // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V. 1400. - 055056. doi:10.1088/1742-6596/1400/5/055056

2. Ziegler J. F., Biersack J. P., Ziegler M. D., SRIM – Stopping and Range of Ions in Matter. URL: www.srim.org. Accessed: May 2022.

3. Многослойные полупроводниковые установки для спектроскопии заряженных частиц на ускорителях / Ю.Б. Гуров, С.В. Лапушкин, В.Г. Сандуковский, Б.А. Чернышев // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2018. Т. 49. Вып. 2. С. 476-581

Магнитная анизотропия тонких плёнок Gr/Fe/h-BN

Е.К.Михайленко^{1,2}, С.М.Дунаевский^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт» (ПИЯФ), Гатчина

²СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

УДК: 538.911, 538.915

Соединения из тонких плёнок на различных подложках представляют собой перспективный для науки и техники объект исследований. В зависимости от материала подложки, тонкого слоя, а также различных их физических свойств (например, магнитных) такие системы демонстрируют ряд важных в практическом применении качеств.

Одним из примеров таких систем является система, образованная тонким слоем железа, покрывающей подложку никеля. Как показано экспериментально, такую систему можно выращивать, интеркалируя железо под слой графена [1] (таким образом, получается система graphene/Fe/Ni, железо при этом растёт в нехарактерной для него ГЦК-структуре решётки). Отдельный расчёт методом DFT с учётом магнитного дипольного взаимодействия показывает возможность существования перпендикулярной магнитной анизотропии в отдельно взятых тонких плёнках такого железа. Однако в данном случае магнитная анизотропия полностью уничтожается плёнками никеля, ориентирующими магнитный момент параллельно плоскости слоя.

Поскольку гексагональный нитрид бора (h-BN), графен и ГЦК-железо обладают очень близкими постоянными решётки, исследование гипотетической системы graphene/Fe/h-BN представляет определённый научный интерес [2]. С одной стороны, нитрид бора представляет собой изолятор, что важно для сохранения перпендикулярной магнитной анизотропии чистого железа, с другой стороны внешний слой графена препятствует его окислению.

В данной работе представлены результаты теоретического DFT-расчёта энергий возможных магнитных структур Fe/h-BN и graphene/Fe/h-BN с учётом оптимизации геометрии структур [2]. Отдельно учтены магнитные дипольные взаимодействия, выявлены конфигурации с минимальной энергией, приходящейся на ячейку. Построены кривые анизотропии и вычислены соответствующие константы.

Результаты расчётов могут быть в итоге полезны для науки (спинтроника), и в практических применениях (устройства магнитной записи, например жёсткие диски).

1. G.S.Grebenyuk et al. Intercalation synthesis of graphene-capped iron silicide atop Ni(111): evolution of electronic structure and ferromagnetic ordering // *Applied Surface Science*. 2017. V. 392. P. 715-732.
2. С.М.Дунаевский, Е.К.Михайленко. Магнитная анизотропия покрытых графеном ультратонких слоев железа на подложке из гексагонального нитрида бора Gr/Fe/h-BN // *Физика твёрдого тела*. 2020. Т. 62. Вып. 11. С. 1955-1959..

Влияние механоактивации на локальную атомную структуру перовскитных материалов по данным рентгеновской спектроскопии

И. О. Нечитайлова, Е. В. Глазунова, Е. Е. Поносова, А. М. Ермакова, Г. Б. Сухарина,
В. В. Срабионян, Л. А. Авакян, Л. А. Бугаев

Южный Федеральный университет, Ростов-на-Дону

На сегодняшний день сегнетоэлектрические материалы привлекают внимание многих исследователей, потому что такие материалы широко применяются в промышленности в качестве различных функциональных устройств.

Особое место среди сегнетоэлектриков занимают вещества со структурой типа перовскит. [1] Одна из их особенностей - уникальные электрофизические свойства, обусловленные определённой локальной атомной структурой, а также возможностью её искажения путём изменения концентрации и типа структурных дефектов, для чего применяется метод механоактивации. [2]

В данной работе проведено исследование малых структурных искажений, образованных в результате механоактивации сегнетоэлектриков следующего состава: $\text{PbFe}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ (PFT) [3] при помощи метода XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) [4]. Выполнен анализ спектров рентгеновского поглощения за K -краем атома железа и L_3 -краем атома тантала в образцах PFT до и после механоактивации, а также моделирование вероятного ближнего окружения атомов тантала и железа в образцах PFT.

На основе проведенного анализа определена зависимость перераспределения пиков А и В в области основного максимума спектра XANES за L_3 -краем тантала в образцах типа $\text{AB}_1\text{B}_2\text{O}_3$ от соотношения количества атомов B_1 и B_2 в первой координационной сфере атома тантала, а также определено локальное окружение атома железа до механоактивации.

Список литературы:

1. Abdulvakhidov. K. et al. Physical properties and structure of mechanically activated solid solution $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.7}\text{Ti}_{0.3})\text{O}_3$ // Applied Physics A: Materials Science and Processing. – 2022. – Vol.128. - №10. – 88.
2. Нестеров А. А., Панич А. А. Технологии синтеза порошков сегнетоэлектрических фаз. – 2010.
3. Sukharina G. B. et al. Structure and Properties of Ferroelectric Materials after Mechanoactivation //Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2018. – Vol. 82. – №. 7. – P. 909 – 912.
4. Usoltzev O. A. et al. How Much Structural Information Could Be Extracted from XANES Spectra for Palladium Hydride and Carbide Nanoparticles //Journal of Physical Chemistry. – 2022. – Vol.126. - № 10. – P. 4921 – 4928.

**Исследование структуры, диэлектрического отклика и поляризации в
релаксорных сегнетоэлектриках $PbNi_{1/3}B_{2/3}O_3$ ($B = Nb$ и Ta)
(Стеновый доклад)**

Е.Д. Обозова, В.Г. Залесский, А.А. Левин, Т.А. Смирнова, С.Г. Лушников

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург

УДК: 537.226.4

Семейство сложных перовскитов с общей формулой $PbB'V''O_3$ и твердых растворов на их основе демонстрируют широкий спектр физических состояний: сегнетоэлектрики, релаксорные сегнетоэлектрики, антисегнетоэлектрики и т.д.[1]. Особый интерес вызывают соединения, в которых один из ионов в В-позиции обладает переменной валентностью и является магнитоактивным. Некоторые соединения из этой группы являются мультиферроиками, в некоторых наблюдается фазовое расслоение [2].

В работе представлены результаты исследования физических свойств малоизученных монокристаллов $PbNi_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ (PCT), $PbNi_{1/3}Ta_{2/3}O_3$ (PNT). Согласно первым исследованиям PNN, на температурной зависимости комплексной диэлектрической проницаемости обнаружены широкие максимумы в окрестности температуры 148 К. Это дало основание включить PNN в семейство релаксорных сегнетоэлектриков. При этом петли диэлектрического гистерезиса, близкие к насыщению, наблюдались только при $T \sim 77$ К, в сильном поле порядка 200 кВ/см, а при охлаждении кристалла вплоть до гелиевых температур зависимость поляризации от поля становилась линейной, несмотря на приложение интенсивных полей до пробивных величин. Еще меньше данных о диэлектрических и полярных свойствах было представлено в литературе для кристаллов PNT. Поэтому температурное поведение диэлектрического отклика и поляризации для родственных, содержащих ионы никеля в одной из В-позиции кристаллов требуют детальных исследований.

В работе представлены результаты исследований кристаллической структуры PNN и PNT с помощью рентгеноструктурного анализа, температурных зависимостей диэлектрической проницаемости в диапазоне частот от 12 Hz до 100 kHz и AC- и DC-проводимости интервале температур 77-700 К. Полярное состояние кристаллов исследовалось методом термостимулированной деполяризации (ТСД).

Проведенные исследования показали, что структура кристаллов в окрестности комнатной температуры является кубической (пр. группа $Pm\bar{3}m$, $a=4.02679(2)$ Å). Температурная зависимость диэлектрической проницаемости $\epsilon(T)$ демонстрирует широкие, частотно-зависимые максимумы в области температур 150 К (PNN) и 89 К (PNT). Ширина максимумов на уровне половины его высоты составляет 145-160 К, что примерно в два раза больше, чем в модельном релаксоре $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$. Результаты анализа данных по AC- и DC-проводимости показали, что энергия активации носителей заряда составляет 770 (PNN) и 950 meV (PNT). Исследования кристаллов с помощью ТСД показывают, что в области температур имеется максимумы тока деполяризации в окрестности 118 К (PNN) и два максимума при 225 и 335 К (PNT), связанные с остаточной поляризацией. Результаты исследований обсуждаются в рамках модели фазового расслоения, ранее предложенной для родственного кристалла $PbCo_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ [2].

1. Smolensky G.A.. Ferroelectrics and Related Materials // NY: Academic Press. 1981.
2. Ханнанов Б.Х., Залесский В.Г., Головенчиц Е.И., Санина В.А., Смирнова Т.А., Щеглов М.П., Боков В.А., Лушников С.Г.. Разделение фаз и зарядовые состояния в релаксорном сегнетоэлектрике $PbCo_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ // ЖЭТФ. 2020. №. 157, С. 523-531.

Исследование наночастиц меди методом рентгеновской дифракции

Я. Сазонова¹, Н.Н. Губанова^{1,2}, В.А. Матвеев¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Гатчина

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребенищикова Российской академии наук (ИХС РАН), г. Санкт-Петербург

Одной из важнейших задач электрокатализа является создание новых каталитических материалов и разработка методов их получения. В качестве наиболее широко применяемых катализаторов являются металлы платиновой группы. Такие катализаторы обладают хорошей каталитической активностью, однако имеют высокую стоимость. Поэтому снижения содержания металлов при сохранении их каталитической активности представляет собой важную с практической точки зрения задачу. Решение данной проблемы может быть найдено путем замены части каталитически активного металла (платины или палладия) на другой более дешевый металл (например, на медь, серебро, никель, кобальт и др.). Это можно осуществить синтезируя биметаллические наночастицы, в которых более дешевый металл будет играть роль носителя.

В данной работе были получены наночастицы меди, которые планируется использовать в дальнейших исследованиях в качестве носителя (ядра) для каталитически активных наночастиц (например, палладия или платины).

Наночастицы Cu были синтезированы путем восстановления медного купороса цинком в водном растворе, ряд образцов был получен с добавлением ПАВ в реакционную смесь. Некоторые образцы наночастиц Cu дополнительно промывались раствором соляной кислоты [1].

Для получения каталитических характеристик биметаллического материала Pd(Cu), наночастицы металлического Pd восстанавливали из водно-спиртового раствора хлорида палладия и осаждали на поверхность наночастиц Cu. Каталитическую активность материала Pd(Cu) оценивали косвенно с помощью метода циклической вольтамперометрии.

Синтезированные образцы исследовались методом рентгенофазового анализа на рентгеновском дифрактометре Rigaku (SmartLab 9кВт, CuK α). Измерения производились в геометрии $\theta/2\theta$ с квазипараллельным пучком, формируемым зеркалом Гёбеля. Для уменьшения искажения пиков перед детектором устанавливался параллельно-щелевой анализатор с расходимостью 0,0228 град.

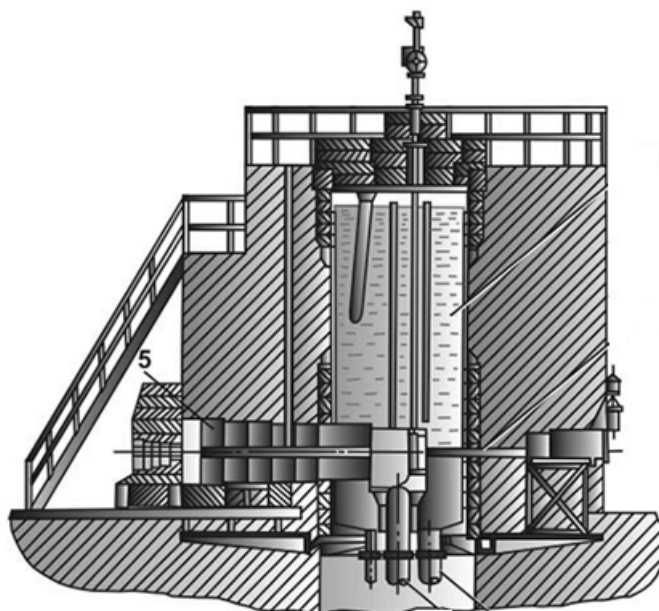
На полученных дифрактограммах образцов, которые не подвергались промывке соляной кислотой, присутствуют брегговские пики, соответствующие кристаллической фазе меди (Cu) и ее оксида (Cu₂O). После промывки данных образцов кислотой, брегговские пики оксида меди либо исчезали, либо становились слабоинтенсивными. Оценка размеров кристаллитов, полученная из уширения брегговских пиков различными методами [2,3] (Шеррера, Вильямсона-Холла и Холдера-Вагнера) показала, что размер получаемых наночастиц Cu лежит в диапазоне 15-45 нм. Были выявлены зависимости между фазовым составом наночастиц и каталитической активностью биметаллического материала Pd(Cu).

[1] Gawande M. B. et al. Cu and Cu-based nanoparticles: synthesis and applications in catalysis //Chemical reviews. – 2016. – Т. 116. – №. 6. – С. 3722-3811.

[2] Голосовский И. В. Дифракция нейтронов и синхротронного излучения на наноструктурированных объектах. (Пособие для студентов и аспирантов) // НИЦ "Курчатовский институт" ПИЯФ. – 2019. – с. 36.

[3] Izumi F. et al. Implementation of the williamson-hall and halder-wagner methods into RIETAN-FP. – 2015. - №3. – С. 33-38.

Физика и техника реакторов и ускорителей



Квадрупольные магнитные линзы для каналов транспортировки ионов FAIR

С.А. Быков^{1,2}

¹ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск

²НГУ, г. Новосибирск

УДК: 537.533.335

В Институте ядерной физики идёт работа над элементами проекта НЕВТ для GSI FAIR. НЕВТ – High Energy Beam Transport, перепускной канал между ускорительными кольцами SIS18, SIS100 и экспериментальными установками.

Целью данной работы является разработка и исследование магнитных квадрупольных линз для перепускного канала НЕВТ. Квадрупольная магнитная линза должна иметь основную вторую гармонику магнитного поля, но в ней присутствуют паразитные гармоники высшего порядка [3, стр. 34-35]. Наибольшее влияние на проходящий пучок из всех высших гармоник оказывает третья секступольная гармоника.

Для измерения использовались вращающаяся катушка [5, стр. 85-95] и каретка с массивом датчиков Холла. Было измерено и исследовано магнитное поле квадрупольных магнитных линз канала от SIS18 до SIS100.

1. Ivan Okunev, Alexandr Batrakov, Valeriy Kobets, and Ivan Morozov Field Measurements of Magnets for Modern SR Sources and FEL // IEEE TRANSACTION ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY, VOL. 26, NO. 4, JUNE 2016.

2. Персов Б.З. Расчёт и проектирование экспериментальных установок // Москва-Ижевск, 2006.

3. Бурдин П.Н., Девятайкина Т.А., Казанцева Э.С., Рыбичкая Т.В., Скарбо Б.А., Старостенко А.А., Цыганов А.С. Улучшение качества поля квадрупольных линз при серийном производстве // ISSN 1818-7994. Вестник НГУ. Серия: Физика. 2012. Том 7, выпуск 3.

4. Th. Zickler Basic design and engineering of normal-conducting, iron-dominated electromagnets // ed. By D. Brandt Proceedings of the CAS-CERN Accelerator School: Magnets, Bruges, Belgium, CERN-2010-004 (2009).

5. Павленко А.В. Диссертация Многофункциональные цифровые интеграторы для прецизионных измерений магнитных полей в элементах ускорителей // Новосибирск – 2015.

6. Винокуров Н.А. Лекции по электронной оптике для ускорительных физиков // wwwold.inp.nsk.su/students/accel/refs/accel-literature.html

Монитор электронного пучка на базе пропорциональных камер в эксперименте "Протон"

С.О. Жеребко^{1,2}

¹ПИЯФ Им. Б.П.Константинова НИЦ «Курчатовский Институт», Гатчина

²Санкт-Петербургский Государственный Университет Аэрокосмического Приборостроения,
Санкт-Петербург

УДК: 53.08

Протон является одним из основных элементов материи. Зарядовый радиус протона, т.е. распределение плотности заряда в пространстве стоит в ряду наиболее важных параметров, который должен быть точно измерен в эксперименте. На данный момент существует значительное (4,5 %) расхождение в результатах измерения зарядового радиуса протона, полученных в опытах по упругому электрон-протонному рассеянию и в экспериментах с мюонными атомами. В 2015 г. группа сотрудников ПИЯФ под руководством проф. А. А. Воробьева предложила новый экспериментальный метод исследования малоуглового ер-рассеяния, в котором детектируются обе частицы в конечном состоянии — электрон и протон отдачи. [1-2]

Управление пучком в эксперименте будет осуществляться на основе монитора положения пучка, расположенного за основным детектором. Монитор состоит из четырех пропорциональных камер (две плоскости X и две – Y). Апертура камер выбрана равной 40x40 мм², чтобы пучок проходил через камеры с минимальными искажениями. На камеры подавалось высокое напряжение -1.8 кВ и использовалась газовая смесь Ar+30% CO₂.

Для отладки этой части детектора и измерения точности монитора пучка была собрана установка, состоящая из пропорциональных камер и коллимированного источника ⁹⁰Sr (β- 545.9 кэВ) на перемещающем устройстве. Интенсивность пучка электронов от источника по порядку величины совпадает с ожидаемой интенсивностью пучка в эксперименте. Сигналы с одной камеры поступают на отдельно стоящий 9-канальный усилитель микротоков, и после преобразования и усиления оцифровываются контроллером DAQ321. С помощью фитирования сигнала гауссианой можно получить абсолютное положение пучка с погрешностью порядка 70 мкм. [3]

1. Dobrovolsky A.V. et al., Nucl.Phys. A 766, 1. 2006.

2. Andreev V.A. et al., Phys. Rev. Lett. 110, 022504. 2013.

3. Бочин Б.В., Грачев В.Т., Кравцов П.А., Трофимов В.А. Пропорциональная камера для настройки пучка. 2021.

Имитации теплового воздействия плазмы в камере токамака частотно-импульсным источником электронного пучка

Н. Абед^{1,2}, Д.А. Никифоров^{1,2}, В.В. Куркучиков^{1,2}, И.В. Кандауров¹

¹Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН, г.Новосибирск

²Новосибирский государственный технический университет, г.Новосибирск

УДК: 53.096

Проблема эрозии вольфрамовой облицовки вакуумной камеры токамака-реактора, находящейся в непосредственном контакте с термоядерной плазмой, в настоящее время вызывает серьёзный интерес. Эта проблема проявляется особенно остро в области дивертора токамака, где наибольшую угрозу для элементов облицовки представляют интенсивные импульсные тепловые нагрузки–срывы плазменного шнура и периодические неустойчивости периферийной плазмы (ELM- Edge Localized Modes тип 1)[1].

Оценочная величина тепловых нагрузок вследствие ELM типа 1 для строящегося международного токамака ИТЭР достигает ~ 0.6 МДж/м² при субмиллисекундной длительности процесса. Частота возникновения ELM-событий в ходе рабочего импульса токамака может быть на уровне десятков герц (при времени жизни плазмы в сотни секунд в одном рабочем импульсе) при этом полное число таких событий за весь жизненный цикл работы установки ИТЭР с термоядерной плазмой может превысить уровень 10⁸.

Экспериментальных данных, позволяющих надежно оценить степень влияния импульсно-периодических тепловых нагрузок на вольфрамовую обшивку дивертора токамака-реактора на протяжении всего срока службы последнего, к настоящему моменту не существует [2].

Таким образом, изучение эрозии вольфрама при циклическом импульсном нагреве на частоте в 10 - 20 Гц, при совокупном числе импульсов нагрева $\geq 10^7$, плотностях энергии ~ 1 МДж/м², субмиллисекундной длительности импульса нагрева и размере облучаемой площади около 1 см², представляется актуальной научной проблемой.

Для имитации теплового воздействия предполагается использовать частотно-импульсный источник электронного пучка с энергией 15 – 20 кэВ на основе накаливаемого катода. Пучок должен обеспечивать экспозиционную нагрузку ~ 100 Дж/см² при длительности импульса около 1 мс на поверхности вольфрамовой мишени на площади около 1 см², работать на частоте 10 – 20 Гц при полном числе импульсов на мишень до 10⁷ без необходимости технического обслуживания.

При создании экспериментального стенда была проведена работа по проектированию источника электронного пучка. С помощью программного пакета UltraSAM [3] был произведен расчет электронной оптики, для транспортировки пучка и получения на мишени пятна облучения с требуемыми характеристиками. Продемонстрирована принципиальная возможность достижения требуемых параметров.

В настоящее время изготовлены основные узлы экспериментального стенда.

Произведена его сборка, идет подготовка к проведению первых экспериментов. Одним из важнейших вопросов здесь является демонстрация проектных параметров пучка и стабильности характеристик термоэмиссионного катода источника при длительной работе на металлическую мишень. Проблемой здесь может стать разрушение материала катода под действием обратного потока ионов, а также загрязнение поверхности катода, и потеря им эмиссионных качеств.

1. Pitts R.A., Bonnin X., Escourbiac F. et al. Physics basis for the first ITER tungsten divertor //Nuclear Materials and Energy. – August 2019. – Vol. 20., 100696.

2. Vyacheslavov L. et. al. //Novel electron beam based test facility for observation of dynamics of tungsten erosion under intense ELM-like heat loads //AIP Conference Proceedings 1771 (2016) 060004.

3. A.V. Ivanov, M.A. Tiunov //ULTRASAM - 2D Code for Simulation of Electron Guns with Ultra High Precision// Proceedings of EPAC 2002, Paris, France, p.1634.

Математическое моделирование установок малоуглового рассеяния нейтронов на реакторе ПИК

**Л.А. Азарова^{1,2}, Е.В. Алтынбаев^{1,2}, Е.Г. Яшина^{1,2}, К.А. Павлов^{1,2}, Ю.М. Кириенко¹,
С.В. Григорьев^{1,2}**

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ “Курчатовский институт”, Гатчина

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт Петербург
УДК: 681.2, 53.08

Петербургский институт ядерной физики (НИЦ “Курчатовский институт” - ПИЯФ) приступил к работам по строительству установок малоуглового рассеяния нейтронов на реакторном комплексе ПИК. Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) является одним из ключевых и наиболее популярных методов, используемых при исследованиях наноструктур и нанобъектов. МУРН это неразрушающий дифракционный метод, при котором рассеяние нейтронов происходит на крупномасштабных неоднородностях (от 1 нанометра до 10 микрометров) и происходит под малыми углами. Этот метод нашел свое применение в широком спектре научных дисциплин: физике, химии, биологии, материаловедении, инженерии и науках о земле [1].

Доклад посвящен разработке и математическому моделированию двух установок малоуглового рассеяния - “TENZOR” и “MEMBRANA”. Установка “TENZOR” это классическая высокопоточная монохроматическая малоугловая установка, предназначенная для решения задач, связанных с магнетизмом и материаловедением. Установка “MEMBRANA” разработана как времяпролетная машина для исследований в области биологии, физики полимеров, материаловедения и изучения кинетики в образцах. В докладе будут представлены основные параметры и характеристики упомянутых выше инструментов.

Мы покажем, что с помощью математического моделирования в программе McStas [2] можно установить необходимую точность юстировки нейтрон-оптических элементов установки, а также определять потери потока нейтронов за счет неидеальности оптической системы. Так, например, расчет потерь потока на нейтронных секциях двадцатиметровой коллимационной системы показал, что при 0.1 мм ошибке склейки двухметровых нейтронных секций из частей по 0.5 м, с учетом волнистости зеркал, потери потока составят от 18 до 20%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения No.075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).

1. Schmatz W. et al. Neutron small-angle scattering: experimental techniques and applications //Journal of Applied Crystallography.1974. Т. 7. №. 2. С. 96-116.

2. Lefmann K., Nielsen K. McStas, a general software package for neutron ray-tracing simulations //Neutron news. 1999. Т. 10. №. 3. С. 20-23.

Проект экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии на действующем Ускорительном комплексе У-70, г. Протвино, Московская область

***А.Г. Васильева¹, Д.А. Васильев¹, В.И. Гаркуша¹, А.В. Калинин¹, С.Н. Корякин²,
А.В. Максимов¹, С.А. Никитин¹, В.А. Пикалов¹, А.П. Солдатов¹, О.В. Суманев¹***

¹НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино

²МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, Обнинск
УДК: 621.039.83

Традиционные методы лечения онкологических заболеваний включают хирургическое вмешательство, химиотерапию и лучевую терапию. Клинические исследования в области лучевой терапии показали, что пучки ускоренных тяжелых ионов углерода, являются одним из лучших инструментов для лечения радиорезистентных опухолей [1]. В докладе представлен обзор технологических решений проекта (шифр «ЛУЧ У-70») по созданию первого в России экспериментально-клинического центра ионной лучевой терапии (ЭКЦ ИЛТ) на базе действующего Ускорительного комплекса У-70 НИЦ «Курчатовский» - ИФВЭ в г. Протвино [1]. В центре будет реализована методика трехмерного облучения глубоко залегающих опухолей углеродным пучком в сеансах терапии. Комплекс ИЛТ будет обеспечивать локальное подведение дозы углеродного излучения к устанавливаемой врачом области первичного очага (мишени) с учётом индивидуальных особенностей геометрии и морфологии пациента и с оптимальным режимом облучения.

Проектируемый центр будет использовать современные принципы оказания медицинских услуг, новейшее медицинское оборудование и инженерные системы. В проекте ЭКЦ ИЛТ предусмотрено несколько функциональных зон. В проекте заложена современная аппаратура вывода ионов углерода в медицинскую зону, а именно: каналы транспортировки и формирования пучка ионов углерода с системой биологической защиты, инженерным и инженерно-технологическим оборудованием, включая магнитооптические элементы. Зона проведения лучевой терапии включает в себя 3 медицинских каньона (терапевтические кабины), где есть 1 фиксированный пучок для терапии пучком ионов углерода методом наложения слоев, 2 горизонтальных тонких «карандашных» (сканирующих) пучка и 1 тонкий «карандашный» пучок под 30° в вертикальной плоскости. Внешним источником генерирующего излучения является медленный вывод ионов с ускорительного комплекса У-70. Энергия ионов углерода регулируемая - от 150 до 435 МэВ/нуклон (6 ступеней). Мощность дозы составляет до 2 Гр/мин при облучении мишени объемом 1 л на глубине от 15 до 25 см.

Предлагаемое в рамках концепции создания ЭКЦ ИЛТ объединение усилий физиков-ускорительщиков НИЦ «Курчатовский институт» - ИФВЭ и медицинских специалистов МРНЦ им. А.Ф. Цыба позволит обеспечить амбулаторный прием пациентов и создать научно-образовательную базу для подготовки технических кадров и медицинских специалистов в области ИЛТ. Конечным результатом данного проекта будет являться, согласно постановлению правительства № 287 от 16.04.2020 [2], создание ЭКЦ с пропускной способностью до 200 пациентов в год для одной медицинской кабины.

1. Проектная документация по объекту «Строительство (реконструкция) объекта капитального строительства - «НИЦ «Курчатовский институт» - ИФВЭ, Реконструкция зд. 1БВ и зд. 8 с целью создания экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии на действующем Ускорительном комплексе У-70, г. Протвино, Московская область» / АО «53 ЦПИ».
2. Постановление Правительства Российской Федерации от 16.03.2019 №287 «Об утверждении Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы»

Расчет центральной области циклотрона Ц-250

И.В. Горбунов, А.В. Галчук, Ю.К. Осина, Ю.И. Стогов

Акционерное Общество «НИИЭФА им. Д.В. Ефремова», г. Санкт-Петербург

УДК: 621.384.633.5

Изохронный циклотрон Ц-250 [1] является единственным проектом циклотрона с конечной энергией протонного пучка свыше 200 МэВ и широким диапазоном регулирования энергии. Энергия протонов на выходе циклотрона изменяется в диапазоне от 30 до 250 МэВ. Для реализации проектных параметров принято нестандартное техническое решение: в диапазоне энергий 30-125 МэВ в качестве ускоряемых частиц использовать отрицательные ионы водорода с последующей обдиркой в протоны на стриппере, а в интервале 125-250 МэВ – протоны с выпуском электростатическим дефлектором [2].

Центральная область циклотрона является ключевой для дальнейшего ускорения и формирования пучка частиц для выпуска. В работе представлены результаты расчета центральной области резонансной системы изохронного циклотрона Ц-250. В ходе расчетов были определены параметры центральной области резонансной системы для обеспечения диапазона регулирования энергии протонного пучка 125-250 МэВ.

Расчеты динамики протонного пучка в центральной области циклотрона Ц-250 выполнены с использованием трехмерных карт электрических полей. На основе моделирования динамики частиц была определена оптимальная конфигурация центральной области резонансной системы циклотрона, обеспечивающая центрирование и вертикальную устойчивость пучка в диапазоне регулирования.

1. Ю.Н. Гавриш, А.В. Галчук, С.В. Григоренко, В.И. Григорьев, Р.М. Клопенков, Л.Е. Королёв, К.А. Кравчук, А.Н. Кужлев, И.И. Межов, В.Г. Мудролюбков, Ю.К. Осина, К.Е. Смирнов, Ю.И. Стогов, М.В. Усанова. Циклотронный комплекс Ц-250. Ядерные и электрофизические установки – источники мощных ионизирующих излучений: сборник тезисов докладов научно-технической конференции 15-18 июня 2021г.- Снежинск, РФЯЦ-ВНИИТФ, 2021, с. 29.

2. K.E. Smirnov, Yu.N. Gavrish, A.V. Galchuck, S.V. Grigorenko, V.I. Grigoriev, R.M. Klopenkov, L.E. Korolev, K.A. Kravchuck, A.N. Kuzhlev, I.I. Mezhov, V.G. Mudrolyubov, Yu.K. Osina, Yu.I. Stogov, M.V. Usanova. CYCLOTRON SYSTEM C-250. RuPAC2021, Alushta, Russia. 27th Russian Particle Acc. Conf. doi:10.18429/JACoW-RuPAC2021-FRA05. PP. 105-107.

Анализ влияния системы умножения мощности на возможность компенсации нагрузки током пучка

Е.В. Дронова¹, А.Е. Левичев²

*^{1,2}ИЯФ СО РАН, Новосибирск
УДК: 53.06*

Для обеспечения высокого темпа ускорения в ускорительных комплексах используют систему умножения мощности SLED, так же ее использование значительно сокращает количество клистронов и длину линейного ускорителя. Однако система SLED имеет сильно нелинейный переходной процесс, в котором максимальная мощность находится, по сути, в одной точке, а дальше спадает [1]. Помимо этого, необходимо заполнить мощностью ускоряющую структуру, поэтому на практике ускоряющая структура заполняется от первого пика, а сам пучок запускают на втором пике, где далее из-за спада мощности последние частицы заметно недоберут энергии, возникает энергетический разброс.

Для эффективного получения позитронов на с-т фабрике необходимо использовать мощный и длительный пучок электронов, в связи с этим возникает вторая проблема – сам пучок. Так как пучок интенсивный, то он подгружает своим полем, то есть частицы, летящие в начале сгустка, наберут большую энергию, а частицы, летящие в конце сгустка, меньшую [2].

В связи с этими эффектами было решено рассмотреть идею возможности компенсации нагрузки током пучка с помощью системы умножения мощности SLED. Суть этой идеи в том, чтобы запускать пучок в ускоряющую структуру до того, как она полностью заполнится мощностью. Считаем, что мощность поступает в структуру с групповой скоростью, в нашем случае это 0,02с, а пучок релятивистский. То есть с точки зрения групповой скорости, пучок пролетает структуру мгновенно, тогда первые частицы возьмут только часть поля, а последние пролетят уже полностью заполненную секцию, а значит наберут энергию больше. Тем самым есть возможность скомпенсировать энергетический разброс. Анализ подобной возможности компенсации нагрузки током пучка с помощью системы умножения мощности SLED, а также его результаты, и представлены в данной работе.

1. Павлов В.М. Линейные ускорители: Часть I: Ускоряющие системы: Учеб. пособие // Новосиб. ун-т. 1999. С. 35–49.
2. Wangler Th. P. RF Linear Accelerators. 2nd completely revised and enlarged edition // WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008, P. 296-308.

**Получение пучков ядер углерода
в диапазоне энергий 200 ÷ 450 МэВ/нуклон на синхротроне У-70**

Ан.М. Маркин¹, В.А. Калинин¹, А.А. Сусленков¹

*¹НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино
УДК: 53.06*

В настоящее время в НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ ведутся работы по созданию первого в России Центра ионной терапии. Пучки ядер углерода являются наиболее совершенным инструментом для лечения широкого спектра онкологических заболеваний. Важным параметром является величина остаточного пробега пучков в пациенте, для большей части случаев она должна меняться в диапазоне от 80 до 260 мм, что в свою очередь соответствует энергиям от 200 до 400 МэВ/нуклон (на выходе из синхротрона У-70 мы имели энергию 450 МэВ/нуклон). Существует два метода изменения величины остаточного пробега: пассивный и активный. В первом, из ускорителя выводятся пучки максимальной энергией 450 МэВ/нуклон, а для достижения необходимого остаточного пробега остальная часть энергии меняется пассивно после их вывода при помощи пассивного регулятора пробега. Однако эффективность метода достаточно низка (большая часть пучков теряется в пассивном регуляторе), вдобавок увеличиваются поперечные размеры пучков, и ухудшается их чистота. Во втором методе, энергия пучков меняется активно (непосредственно в ускорителе), что дает высокую эффективность, однако данный метод трудноосуществим в У-70. По результатам анализа данных вариантов, было решено, что приоритетным все же является второй.

Пучки ионов углерода, предварительно ускоренные в линейном ускорителе И-100 до энергии 16.7 МэВ/нуклон, инжектируются в бустерный синхротрон У-1.5, где происходит их дальнейшее ускорение до энергии 450 МэВ/нуклон, затем сгусток ионов переводится из бустера в основной синхротрон У-70. Для формирования магнитных циклов замедления, кольцевой электромагнит (КЭМ) У-70 запитывается от программируемого маломощного источника питания [1]. Также подбираются параметры работы основных систем: коррекции магнитного поля (градиента, квадратичной нелинейности, гармонической коррекции орбиты в горизонтальном и вертикальных направлениях, резонанса связи и др.); ускоряющей системы У-70; задающего генератора; радиального и фазового контуров обратной связи по пучку; системного таймера У-70. В сеансах работы на У-70 были решены задачи по освоению режимов замедления до необходимых энергий с контролем различных параметров [2] и получению пучков в заданном диапазоне энергий для дальнейших исследований в области лучевой терапии.

1. An. Markin, V. Kalinin, O. Lebedev, D. Hmaruk «Upgrading of the power supply for magnet U-70 synchrotron», Proceedings of RuPAC2018, Protvino, Russia, October 1-5, 2018, p.: 335 - 336, DOI: 10.18429/JACoW-RUPAC2018-WEPSB26.
2. V.T. Baranov, V.N. Gorlov, D.A. Savin and V.I. Terekhov «Fast Wire Scanners for U-70 Accelerator of ИФВЭ», Proceedings of RuPAC2018, Protvino, Russia, October 1-5, 2018, p.: 459 – 461, DOI: 10.18429/JACoW-RUPAC2018-THPSC24.

Исследование конструктивных особенностей новой высокоплотной газовой ячейки UniCell для изучения сверхтяжёлых элементов
Д. Симоновски^{1,2}

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет, Университетская наб. 7/9, 199034, Санкт-Петербург

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», 188300 Гатчина, Ленинградской области
УДК:533

В рамках проекта SHIPTRAP в институте GSI ведутся предварительные работы по созданию уникальной газовой ячейки UniCell с дополнительной камерой экстракции с целью исследования короткоживущих сверхтяжёлых элементов. Новая экспериментальная газовая ячейка UniCell должна обеспечить высокоэффективную и быструю (в несколько миллисекунд) транспортировку термализованных короткоживущих сверхтяжёлых ионов [1]. Таким образом, экспериментальное измерение основных физических свойств (масса, спин, период полураспада) этих короткоживущих нуклидов, синтезированных в ядерных реакциях холодного или горячего слияния, становится возможным при использовании новой газовой ячейки UniCell.

В настоящей работе представлены результаты исследования конструкции газовой ячейки UniCell и основные параметры транспортировки продуктов ядерных реакции в пределах всей ячейки. Таким образом была полностью технически смоделирована газовая ячейка UniCell с учётом ряда технических параметров [1] и был сделан дизайн выходного сопла газовой ячейки.

Излагаются результаты математических расчётов и физических симуляций в программе COMSOL Multiphysics по определению оптимальной толщины DC-электродов и числа металлических ниток на первом сеточном электроде, которые находятся в первой/входной части мишенной камеры относительно направления движения/прокачки благородного газа гелия. Определение этих параметров нужно для обеспечения оптимального градиента электрического поля для высокоэффективной транспортировки термализованных ионов в газовой ячейке UniCell к её выходу. Также были проведены симуляции для определения скорости газового потока гелия через всю длину газовой ячейки, включая выходное сопло. На основании этих данных было численно определено максимальное время транспортировки ионов из передней части ячейки к её выходу [2]. Исследованы также особенности функционирования второй части газовой ячейки, включающей около 175 тонких золотых электродов с их подключением к сопряжённым источникам прямого и переменного тока [2,3]. Для определения нужной мощности источников тока была аналитически и численно определена ёмкость системы электродов и их реактивное сопротивление.

Автор благодарит сотрудников лаборатории физики экзотических ядер ПИЯФ и группы TASCA-SHIPTRAP за плодотворные дискуссии.

1. V. Varentsov, A. Yakushev, Concept of a new Universal High-Density Gas Stopping Cell Setup for study of gas-phase chemistry and nuclear properties of Super Heavy Elements // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2019. V. 940. P. 206–214.
2. C. Droese et al., The cryogenic gas stopping cell of SHIPTRAP // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2014. V. 338. P. 126–138
3. A.V. Tolmachev et al., Simulation-based optimization of the electrodynamic ion funnel for high sensitivity electrospray ionization mass spectrometry // International Journal of Mass Spectrometry. 2000. V. 203. P. 31–47

Разработка станции измерения интенсивности циркулирующего пучка на ускорителях У-1,5 и У-70

В.И.Терехов, А.А.Суслёнков

НИЦ «Курчатовский институт» - ИФВЭ, Протвино

Важнейшим параметром, характеризующим работу ускорительного комплекса У-70, является интенсивность циркулирующего пучка. Этот параметр необходим для оптимизации инъекции, ускорения и вывода пучка. Информация об интенсивности пучка может быть получена как измерением заряда отдельного сгустка и суммированием результатов по всем сгусткам, так и измерением среднего тока в ускорителе. В ИФВЭ на ускорителях У-70 и У-1,5 интенсивность циркулирующего пучка измеряется созданными более 30 лет назад системами, основанными на трансформаторах с большой постоянной времени (порядка десятков секунд). Достигнутая точность измерений не лучше 5% в диапазоне $5 \cdot 10^{10}$ - 10^{13} частиц.

Развитие в ИФВЭ экспериментальной физической базы, включая создание радиобиологического комплекса и импульсного нейтронного источника (проект ОМЕГА), вызывает необходимость использования расширенного диапазона рабочих интенсивностей циркулирующего пучка в У-70 от $5 \cdot 10^8$ (C^+ -ионов) до $3 \cdot 10^{13}$ протонов, что соответствует диапазону рабочих токов пучка от 100 мкА до 1 А. Это обстоятельство вызывает вопрос о создании качественно новой системы измерения интенсивности. Речь идёт о необходимости разработки и создания программно-аппаратных средств, позволяющих в условиях значительного уровня электромагнитных помех, обеспечить измерения интенсивности пучков в заданном диапазоне с точностью не хуже 2%. Необходимое разрешение по току должно составить не менее 0.8 мкА с высокой долговременной стабильностью. Реализация такой аппаратуры требует создания по одной измерительной станции на основе тороидальных трансформаторов постоянного тока (ТПТ) [1,2]. Для придания большей функциональности каждую станцию ТПТ планируется дополнить быстрым импульсным трансформатором тока (ИТТ) на основе отдельного тороида. Это позволит измерять временную структуру пучка и оптимизировать работу вводного и выводного оборудования. Станции для обоих ускорителей отличаются только апертурой сердечников: для У-1,5 – 155 мм, а для У-70 – 210 мм.

Техническая реализация этих станций невозможна без успешного решения проблемы подавления электромагнитных помех, вызванных работой мощного электрофизического оборудования (источники питания магнитов, вакуумные насосы и др.). Поэтому, вопросу эффективного экранирования было уделено особое внимание. Признано целесообразным использование 4-х концентрических экранов: внешний - из стали марки 45 толщиной 10 мм и 3-х пермаллоевых экранов марки 79НМА толщ. 1,5 мм.

В докладе представлены выбор и обоснования конструкции измерителей и приведены соответствующие электрические расчеты.

1. Unser K. Beam current transformer with DC to 200 MHz range // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1969. V. 16, No. 3. P. 934–938.

2. Unser K. The parametric current transformer, a beam current monitor developed for LEP // CERN SL/91-42. Geneva, Switzerland, 1991.

Моделирование трактов транспортировки протонных пучков в проекте ядерной медицины в НИЦ КИ – ПИЯФ

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

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

УДК: 53.06

В НИЦ КИ – ПИЯФ рассмотрен и согласован проект комплекса ядерной медицины на основе изохронного циклотрона Ц-80. Проект предусматривает проектирование здания, создание станций по отработке методов получения востребованных радионуклидов и радиофармпрепаратов на их основе. Не исключена коммерческая составляющая. Также предусмотрено создание комплекса протонной терапии органов зрения. Особенностью проекта является обеспечение независимой и одновременной работы сразу двух пучков: первого (ИЗОТОП) с энергией 40-80 МэВ с интенсивностью до 100мкА – для получения радиоизотопов, второго (ОКО) с энергией 70 МэВ и с интенсивностью до 10мкА – для целей офтальмологии. Это требует серьезной модернизации системы вывода пучков из циклотрона Ц-80. В работе [1] представлены расчетные оптимизированные линии транспортировки пучков и их характеристики. Вывод двух пучков из циклотрона Ц-80 рассчитывался по программе «Орбита – 1» [2].

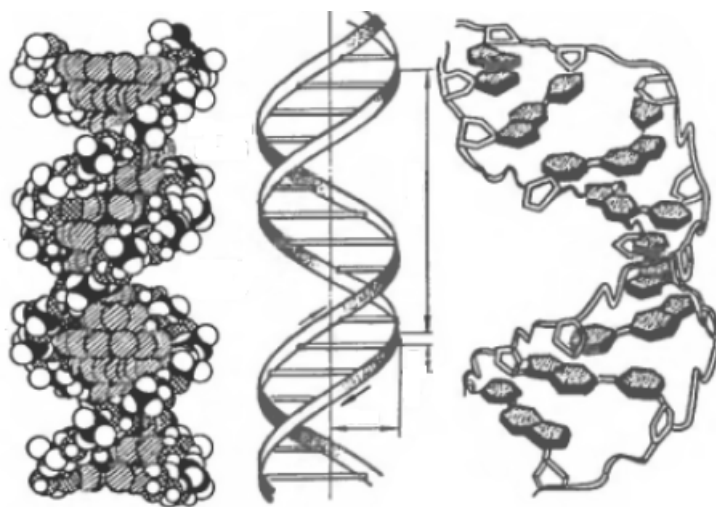
Оптимизация трактов транспортировки частиц выполнялась с помощью, созданной в НИЦ КИ – ПИЯФ программы «PROTON_MC» [3], которая выполняет расчёт и оптимизацию методом Монте-Карло. Оптимальные параметры магнитных элементов пучка для этапа ИЗОТОП находились при условиях минимальных потерь частиц в тракте транспортировки, и чтобы размер пучка на мишени был не менее 20 мм.

Тракт доставки протонного пучка ОКО удовлетворяет специальным требованиям: энергия пучка 60-70 МэВ; диаметр пучка на входе в процедурную ≈ 60 мм; угол расходимости пучка ≈ 1 mrad; однородность пучка в области $\varnothing 60$ мм не менее 90%. Для формирования пучка удовлетворяющего требованиям этапа ОКО был сконструирован тракт с пассивным рассеивателем из танталовой (Ta) фольги толщиной 300 μm .

В заключении нужно отметить, что нам удалось разместить необходимое оборудование в пределах выделенной площади, которая весьма ограничена. Также расчеты показывают, что такая конфигурация каналов обеспечит протонный пучок с требуемыми параметрами.

1. D. A. Amerkanov, S. A. Artamonov, E. M. Ivanov, V. I. Maximov, G. A. Riabov, V. A. Tonkikh. Conceptual project of the proton beam lines in the nuclear medicine project of the "KURCHATOV INSTITUTE" – PNPI // Proc. 27th Russian Particle Accelerator Conf. (RuPAC'21), 2021, P. 189.
2. N. K. Abrosimov, G. A. Ryabov, A. N. Chernov, Preprint PNPI-2851, Gatchina, 2010.
3. D. A. Amerkanov, E. M. Ivanov, G. A. Riabov, V. A. Tonkikh. Calculation and optimization of high-energy beam transfer lines by the Monte Carlo method// Proc. 27th Russian Particle Accelerator Conf. (RuPAC'21), 2021, P. 262.

**Микросимпозиум
Курчатовского геномного центра – ПИЯФ
«Биоинформатика, биоинженерия,
генетические технологии»**



Доказательство патогенности нового варианта гена *MSH6*, ассоциированного с синдромом Линча

А.Д. Шахматова, О.А. Вострюхина, Е.Д. Мирлина, Ю.В. Киль, В.Н. Вербенко

ФГБУ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

УДК: 575.224; 616-006

Колоректальный рак занимает 3-е место по частоте встречаемости среди онкологических заболеваний. Его наиболее распространенная наследственная форма – синдром Линча (LS) [1], при котором в нескольких поколениях семьи развиваются рак различных отделов кишечника и эндометрия. Исходная причина – герминальная мутация с потерей функции в одном из четырех генов: *MLH1*, *MSH2*, *MSH6* и *PMS2*, кодирующих белки системы коррекции неспаренных оснований ДНК. Дефекты в гене *MSH6* встречаются не часто, но могут быть вредными в гетерозиготном состоянии.

Объектом исследования стала семья из трех поколений с подозрением на синдром Линча. Для выявления причин патогенеза было проведено полноэкзомное секвенирование (WES) ДНК пробанда. Анализ данных WES выявил 32895 мутаций в геноме пробанда. Мы провели скрининг на наличие патогенных мутаций, проверяя 105 генов, ассоциированных с предрасположенностью к различным опухолевым синдромам, и выбирали только варианты с малой частотой аллелей в базах данных Ensembl, ExAC browser и gnomAD. Мы идентифицировали замену chr2:28023059 G>T (GRCH37/hg19), вызывающую нонсенс-мутацию в гене *MSH6*. Можно предсказать, что эта мутация приведет к обрыву аминокислотной цепи после лизина-161 (p.G162Ter) в N-концевом домене белка *MSH6*. Нонсенс-вариант *MSH6*: с.484G>T отсутствовал во всех базах данных, и в литературе не упоминался как вариант, ассоциированный с синдромом Линча. Нонсенс-вариант *MSH6*: с.484G>T был выбран для дальнейшего исследования.

Доказательством значимости мутации является ее наследование членами семьи и биоинформационный анализ. Результаты секвенирования ДНК пробанда и двух членов семьи, включая одного пациента и одного здорового члена семьи, по методу Сенгера подтвердили, что все три члена семьи являются носителями нонсенс-варианта *MSH6*: с.484G>T. Была построена SWISS-модель гомологии N-концевых фрагментов белка *MSH6* дикого типа и вариантного белка. Стоп-кодон устраняет домен взаимодействия с *MSH2*, MutS-коннектор, кор, зажим и C-концевой домен. Программа Aminode подтвердила, что глицин в 162 положении, находится в консервативном районе. Кроме того, Cancer Genome Interpreter идентифицирует вариант *MSH6* с.484G>T как драйверную мутацию. MutationTaster указывает на то, что эта однонуклеотидная замена является вредоносной. Программа ConSurf Results показала, что G162 высоко консервативный и функциональный остаток.

Основываясь на рекомендациях Американского колледжа медицинской генетики и геномики [2], можно сделать вывод, что новый ранее не описанный вариант гена *MSH6* является патогенным, так как имеет необходимый набор критериев: PVS1, PM2, PP1 и PP3.

Благодарности: авторы выражают благодарность Г.М. Бутрович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ; Д.Н. Хмельковой, Центр генетики и репродуктивной медицины «Генетико», Москва; И.Л. Полячкину, А.С. Артемьевой, А.В. Гуляеву, Национальный медицинский исследовательский центр онкологии имени Н.Н. Петрова, Санкт-Петербург.

1. Lynch H.T. et al. Milestones of Lynch syndrome: 1895–2015 // Nat Rev Cancer. 2015. V. 15. No. 3. P. 181–194.
2. Richards S. et al. Standards and guidelines for the interpretation of sequence variants: a joint consensus recommendation of the American College of Medical Genetics and Genomics and the Association for Molecular Pathology // Genet Med. 2015. V. 17. No. 5. P. 405–424.

Новые фармакологические шапероны в восстановлении активности глюкоцереброзидазы на пациент-специфичных клетках

А.Э. Копытова¹, М.А. Николаев^{1,2}, Е.В. Григорьева³, Г.В. Байдакова⁴, А.Д. Изюмченко¹,
С.В. Павлова³, Е.С. Яркова³, Д.А. Сорогина³, И.В. Милюхина^{2,5}, В.А. Безруких⁶,
Е.Ю. Захарова⁴, С.Н. Пчелина^{1,2}, А.К. Емельянов^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

² ФГБОУ ВО ПСПбГМУ им. акад. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

³ ФГБНУ ФИЦ ИЦиГ СО РАН, Россия

⁴ ФГБНУ «МГНЦ», Москва, Россия

⁵ ФГБНУ ИМЧ РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁶ ФГБУ «НМИЦ им. В. А. Алмазова», Санкт-Петербург, Россия

УДК 577.29, 575.1

Мутации в гене *GBA*, кодирующем лизосомный фермент глюкоцереброзидазу (GCase), приводят к развитию болезни Гоше (БГ) и являются фактором высокого риска болезни Паркинсона (БП). Фармакологические шапероны (ФШ) могут быть эффективны в лечении БГ и БП, ассоциированной с мутациями в гене *GBA* (GBA-БП). Одним из перспективных ФШ GCase является NCGC00241607 (N07) [1].

Целью данного исследования является оценка эффективности новых ФШ GCase *in vitro* на первичной культуре макрофагов и дофаминергических (ДА) нейронах, дифференцированных из индуцированных плюрипотентных стволовых клеток (ИПСК), полученных из мононуклеаров пациентов с мутациями гена *GBA*.

Для оценки эффективности ФШ N07 и предложенных нами модификаций N2 и N3 нами проведена оценка активности и количества GCase, транслокации GCase в лизосому, количества субстрата гексозилсфингозина (HexSph), степени аутофагии, цитокиновый профиль в первичной культуре макрофагов пациентов с БГ и GBA-БП и ДА нейронах, дифференцированных из ИПСК, пациентов с GBA-БП, по методикам, описанным ранее с модификациями [2].

ФШ N07 повышает активность GCase в 1,3-раза в макрофагах пациентов с БГ, при этом в макрофагах пациентов с GBA-БП (N370S/WT) ФШ N07, N2 и N3 повышают активность GCase в 1,5-, 2,9- и 2,8-раз ($p < 0.05$). ФШ N07, N2 и N3 повышали эффективность транслокации GCase в лизосому в макрофагах пациентов с БГ ($p < 0.05$). В макрофагах пациентов с GBA-БП модификации N2 и N3 снижают концентрацию HexSph в 14,5- и 11,6-раза, при этом в макрофагах пациентов с БГ ФШ N07, N2 и N3 снижают концентрацию HexSph 4,0-, 7,9- и 5,7-раза ($p < 0.05$). ФШ N07 и N2 увеличивают количество белка GCase в 1,5- и 1,2-раз в макрофагах пациентов с БГ ($p < 0.05$). Исследуемые ФШ не оказывали влияния на степень аутофагии в макрофагах пациентов с БГ ($p > 0.05$). ФШ N07 повышает концентрацию IL-10 и снижает IL-1b в макрофагах пациентов с БГ ($p < 0.05$). При этом модификация N2 снижает секрецию цитокинов IL-13, IL-31, IL-4 ($p < 0.05$). ФШ N07 и N2 повышают активность GCase в 1,1- и 1,14-раза, и количество белка GCase в 1,7- и в 1,4-раза, а также транслокацию в случае соединения N2 и N3 на ДА-нейронах пациента с GBA-БП (N=1) ($p < 0.05$).

Нами разработаны и синтезированы новые таргетные препараты, восстанавливающие функцию GCase (модификации соединения ФШ N07 – N2 и N3), эффективность которых впервые показана на макрофагах и ДА-нейронах, дифференцированных из ИПСК, пациентов с мутациями гена *GBA*.

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

1. Aflaki E. et al. Salicylic acid derivatives useful as glucocerebrosidase activators. U.S. Patent US2015065469A1, 2015.
2. А. Э. Копытова и соавт. Таргетная терапия болезни Паркинсона // Бюллетень Национального общества по изучению болезни Паркинсона и расстройств движений. 2022. № 2. С. 103-110.

Ассоциация аллельных вариантов гена *ARSA* с болезнью Паркинсона на основе NGS-анализа

*М.В. Белецкая¹, А.А.Тюрин^{1,2}, Д.Г. Кулабухова^{1,2}, И.В.Миллюхина^{1,2}, А.А.Тимофеева¹,
К.А. Сенкевич^{1,3}, А.К. Емельянов^{1,2}, С.Н. Пчелина^{1,2}*

¹ГБОУ ВПО «Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. ак. И.П.Павлова», Санкт-Петербург, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

³Department of Neurology and neurosurgery, McGill University, Montréal, QC, Canada

УДК 575.224.22, 616.858, 57.087.1

В течение последних лет обсуждается вклад мутаций в генах лизосомных болезней накопления (ЛБН) в риск развития распространённого нейродегенеративного заболевания, болезни Паркинсона (БП). Известно, что мутации в гене глюкоцереброзидазы (GBA), в гомозиготном состоянии приводящие к развитию ЛБН – болезни Гоше, являются фактором высокого риска БП [1;2]. Предполагается, что мутации в гене арилсульфатазы А (*ARSA*), в гомозиготном состоянии приводящие к развитию другой ЛБН – метахроматической лейкодистрофии (МЛД), могут быть ассоциированы с БП [3].

Целью настоящей работы была оценка ассоциации вариантов гена *ARSA* с БП в российской популяции.

Для проведения данного исследования были собраны образцы ДНК 526 пациентов с БП и 487 неврологически здоровых индивидуумов (контроль), сопоставимых по полу и возрасту. На приборе NovaSeq SP PE100 было проведено массовое параллельное секвенирование с использованием панели генов, ассоциированных с развитием ЛБН. Анализ патогенности редких вариантов с минорной аллельной частотой менее 1% был проведен с использованием программ прогноза патогенности (PolyPhen 2 и GERP ++). Методом секвенирования по Сенгеру проведен поиск мутаций в гене *ARSA*, в семье пробанда с МЛД (мутация с.465G>T, р.Gln155His/ с. 1150G>A, р. Glu384Lys) и случае БП с ранним началом у бабушки пробанда по материнской линии.

Было выявлено 16 пациентов с БП и 10 индивидуумов контрольной группы, являющихся носителями редких вариантов генов ЛБН. Интересно отметить, что у 5 из 16 пациентов с БП были выявлены патогенные варианты гена *ARSA*, (rs750005732:C:A, 22:51066039:C:A, rs752949477:C:T, rs199476349:C:T, 22:51064620:T:C) при этом в контрольной группе вариантов в данном гене выявлено не было. С помощью секвенирования по Сенгеру был проведен поиск вариантов с.465G>T, р.Gln155His в экзоне 2 и с. 1150G>A, р. Glu384Lys в экзоне 7 гена *ARSA* у пробанда, страдающим с МЛД и у его родственников. У бабушки пробанда (возраст: 62 года) по материнской линии, страдающей БП с ранним началом, была выявлена мутация гена *ARSA* (вариант с. 1150G>A, р. Glu384Lys). Однако, у брата (возраст: 70 лет) и сестры (возраст: 60 лет) бабушки пробанда, без симптоматики БП, мутации в гене *ARSA* отсутствовали.

Полученные нами данные подтверждают вклад аллельных вариантов гена *ARSA* в патогенез БП.

- 1.Emelyanov A.K. et al. Mutation analysis of Parkinson's disease genes in a Russian data set. // Neurobiology of Aging. 2018. V.71. No 11. P. 267-272.
- 2.Balestrino R. et al. Parkinson disease. // European Journal of Neurology. 2019. V. 27. No 1. P. 27-42.
- 3.Angelopoulou E. et al. Arylsulfatase A (ASA) in Parkinson's Disease: From Pathogenesis to Biomarker Potential. // Brain sciences. 2020. V. 10. No 10. P. 713-726.

Исследование микробиологических и биохимических свойств чайного гриба в зависимости от добавления растительных экстрактов

Д.А. Головкина^{1,2}, И.М. Лапина^{1,2}, Е.В. Журишкина^{1,2}, А.Е. Комиссаров¹, Ф.К. Ермилов¹, А.М. Барсегян¹, А.А. Кульминская^{1,2}

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

²Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина, Россия

УДК: 663.86.054.2, 663.1, 613.292, 633.529.3, 633.529.2

Недавно особую популярность в мире стал приобретать напиток на основе чайного гриба, который является конечным результатом ферментации чая путем добавления закваски бактерий и дрожжей под названием SCOBY (Symbiotic Culture of Bacteria and Yeast). Характерный микробиом чайного гриба включает несколько родов уксуснокислых бактерий, дрожжей, а также молочнокислых бактерий [1]. Перспективными компонентами для создания функциональных продуктов питания являются экстракты из бурых водорослей, содержащие ряд биологически активных соединений. Также интерес представляют экстракты из лишайников Исландского мха (*Cetraria islandica*) активно использующиеся в народной медицине. Эти экстракты обладают иммуномодулирующей, антимикробной и противоопухолевой активностью [2,3]. До конца не известно влияние на активность в отношении SCOBY введение новых химических веществ при ферментации чайного гриба. Поэтому данные исследований по селекции штаммов микроорганизмов, присутствующих в SCOBY, и их адаптации к новой среде ограничены и представляют собой перспективу дальнейших исследований.

В исследовании рассматривается введение в состав ферментируемого чая экстрактов бурых водорослей *Fucus vesiculosus* и лишайника *Cetraria islandica*, а также смеси этих экстрактов. В ходе экспериментов было выявлено следующее:

- Введение экстракта водорослей в состав снижает pH напитка по сравнению с исходным;
- В зависимости от образца увеличение биомассы идет с разной скоростью, но к 14 дню ферментации оно приходит к единому значению;
- Изменения содержания полифенолов и антиоксидантной активности не происходит в зависимости от внесения добавок. Антиоксидантная активность всех образцов комбучи выше, чем у зеленого чая.

С помощью метагеномного анализа на 12 день ферментации чайного гриба было выявлено, что при внесении экстракта водорослей микробиом культуры SCOBY становится более разнообразным.

Таким образом, можно сказать, что внесение добавок не оказало отрицательного влияния на биохимические свойства комбучи. Внесение экстрактов бурых водорослей *Fucus vesiculosus* привело к появлению разнообразия в микробиологическом составе симбиотической культуры SCOBY.

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

1. Villarreal-Soto, S. A., Bouajila, J., Pace, M. et al. Metabolome-microbiome signatures in the fermented beverage, Kombucha. *International Journal of Food Microbiology*. 2020. - Vol. – 333, P. - 108778.
2. André, R., Guedes, L., Melo, R., Ascensão, L. et al. Effect of Food Preparations on In Vitro Bioactivities and Chemical Components of *Fucus vesiculosus*. *Foods*. 2020. - Vol. - 9(7), P. - 955.
3. Grujičić, D., Stošić, I., Kosanić, M., et al. Evaluation of in vitro antioxidant, antimicrobial, genotoxic and anticancer activities of lichen *Cetraria islandica*. *Cytotechnology*. 2014. - Vol. - 66(5), P. - 803–813.

**Исследование процесса получения рекомбинантных белков в
суспензионном биореакторе
Н.А. Панкратова¹, Е.В. Гусева¹**

¹ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Москва
УДК 57.576.08, 004.94:942

Производство рекомбинантных белков в настоящее время является одним из наиболее значимых и быстроразвивающихся направлений в биоинженерии. Основной экспрессионной системой по-прежнему остаются бактериальные клетки *Escherichia coli*. Кишечная палочка является подходящим организмом для синтеза рекомбинантных белков и является очень удобным объектом для проведения исследований, призванных создавать новые препараты, которые можно получать только микробиологическим путём, и, как следствие, помочь в лечении пациентов с различными заболеваниями.

Исследования по культивированию *Escherichia coli* проводились в НИЦ эпидемиологии и микробиологии им. Н.Ф. Гамалеи в суспензионном биореакторе Bioengineering NLF 30. Задачей процесса культивирования бактериальных клеток являлось получение рекомбинантного белка BMP-2, предварительно ген этого белка был внедрен в клетку. Этот белок обладает выраженными остеоиндуктивными свойствами и успешно применяется в регенерационной медицине, для заживления и замещения дефектов костной ткани.

Условия культивирования оказывают влияние на скорость роста культуры и итоговое значение синтеза целевого белка. На массоперенос и смешивание в основном влияют скорость мешалки и ее тип, количество мешалок на валу, а также расход используемого газа [1].

Для аэробного процесса, такого как культивирование *Escherichia coli*, подача кислорода имеет решающее значение и должна осуществляться непрерывно. Концентрация растворенного кислорода зависит от скорости перехода кислорода из газовой фазы в жидкую, из жидкой фазы в клетки и поглощения кислорода микробом [2].

С целью получения оптимальных объемов выхода целевого продукта были изучены такие параметры как температура культивирования, время проведения процесса, влияние аэрации и перемешивания.

В процессе культивирования температура поддерживалась на уровне 37°C. Концентрация ионов водорода (pH) практически не менялась в течение всего процесса культивирования и составляла 7,2 ед. рН. Перемешивание осуществлялось при помощи двухъярусной турбинной мешалки. Работа мешалки была напрямую связана с изменением количества растворенного кислорода (pO₂) в среде. Перед засевом значение было близким к 100% при начальной скорости перемешивания 250 об/мин. Через 50-60 мин. наблюдалось интенсивное потребление кислорода, поэтому при падении pO₂ ниже 30%, скорость перемешивания увеличивали на 100 об/мин.

С помощью программного пакета Ansys Fluent было проведено исследование гидродинамической обстановки в суспензионном биореакторе. Данный программный пакет имеет широкий спектр возможностей моделирования течений жидкостей и газов с учетом турбулентности, теплообмена и химических реакций.

В результате моделирования турбулентного режима внутри биореактора были получены профили распределения кинетической энергии турбулентности и скорости дисперсной фазы при разных скоростях работы мешалки.

1. Linek V, Kordac M, Moucha T. Mechanism of mass transfer from bubbles in dispersions. Part II: Mass transfer coefficients in stirred gas-liquid reactor and bubble column // Chem Eng Process. 2005. V. 44. P. 121-30.
2. Garcia-Ochoa F., Gomez E. Bioreactor scale-up and oxygen transfer rate in microbial processes: An overview // Biotechnology advance. 2009. V. 27(2). P. 153-176.

Создание трансгенных клеточных линий *Drosophila melanogaster* для изучения роли С-пептида в развитии патологических осложнений сахарного диабета

Е.В. Рябова, Е.М. Латынова, С.В. Саранцева

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

УДК: 577.2

В современном мире количество людей, страдающих сахарным диабетом, неуклонно растет. Излечиться от диабета полностью невозможно, и пациенты должны на протяжении всей жизни контролировать уровень сахара в крови и соблюдать предписанную врачом диету. Однако даже тщательный контроль уровня сахара не защищает от развития и прогрессирования хронических (поздних) осложнений сахарного диабета, что делает поиск альтернативных терапевтических стратегий, направленных на этиологические факторы патогенеза диабетических осложнений, особенно актуальным.

С-пептид является продуктом биосинтеза инсулина и образуется при расщеплении молекулы проинсулина. В настоящее время получены надежные доказательства того, что С-пептид контролирует множество внутриклеточных сигнальных каскадов и предотвращает развитие осложнений диабета [1]. Это было подтверждено клиническими исследованиями: пациенты с сахарным диабетом 1 типа, у которых функция β -клеток полностью прекращается, но которые сохраняют низкий, но определяемый уровень С-пептида, менее склонны к развитию микрососудистых осложнений [2]. Однако клеточный механизм действия С-пептида остается неизвестным.

D.melanogaster все чаще используют в качестве модельного организма для исследования нарушений метаболизма человека, благодаря сходству процессов усвоения, хранения и метаболизма питательных веществ у человека и плодовой мушки [3-6]. Создание трансгенных мух, содержащих последовательность проинсулина человека с нативным и укороченным С-пептидами, а также одиночным С-пептидом, позволит изучить роль С-пептида в развитии хронических осложнений сахарного диабета.

В перспективе понимание механизма действия С-пептида на клеточном уровне может способствовать разработке лекарственных средств, ослабляющих развитие осложнений у пациентов, страдающих сахарным диабетом.

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

1. Шпаков, А.О. и О.К. Гранстрем, С-пептид: структура, функции и молекулярные механизмы действия // Цитология. 2013. Е.55 №13 . С.16-27.
2. Luppi, P., V. Cifarelli, and J. Wahren. C-peptide and long-term complications of diabetes // *Pediatr Diabetes*. 2011. V.12. №3. P. 276-92.
3. Baker, K.D. and C.S. Thummel. Diabetic larvae and obese flies-emerging studies of metabolism in *Drosophila* // *Cell Metab*. 2007. V.6. №4. P. 257-66.
4. Alfa, R.W. and S.K. Kim. Using *Drosophila* to discover mechanisms underlying type 2 diabetes // *Dis Model Mech*. 2016. V.9. №4. P. 365-76.
5. Bharucha, K. The epicurean fly: using *Drosophila melanogaster* to study metabolism // *Pediatr Res*. 2009. V. 65. №2. P. 132-7.
6. Gálíková, M. and P. Klepsatel. Obesity and Aging in the *Drosophila* Model // *Int J Mol Sci*. 2018. V.19. №7.

Определение уровня экспрессии гена *swiss cheese* в семенниках *Drosophila melanogaster*

И.В. Ткачева^{1,2}, Е.В. Рябова¹, Е.М. Латынова¹, С.В. Саранцева¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, г. Гатчина, Россия

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

УДК: 575. 21

Ген *swiss cheese* (*sws*) *Drosophila melanogaster* кодирует (лизо)фосфолипазу, которая специфична к лизофосфатидилхолину, расщепляя его до глицерофохолина и жирной кислоты. На протяжении долгого времени функция гена изучалась только в нервной системе [1], однако недавно было показано, что его функция необходима в репродуктивной системе самцов [2]. Так, у самцов с мутацией *sws*¹ происходит нарушение подвижности сперматозоидов и снижается уровень АТФ в семенниках, что может быть связано с нарушением сперматогенеза. Однако сперматогенез является сложным и многостадийным процессом, который поддерживается функцией множеством генов на разных его этапах. Более того, выявляют всё больше мутаций в гене *NTE/PNPLA6* человека, который является ортологом гена *sws* *Drosophila melanogaster*, связанные с синдромами Буше-Нойхаузера, Оливера-МакФарлейна, Лоренса-Муна, Гордона Холмса. Эти синдромы включают в себя атаксию, хориоретинальную дистрофию, спастичность и гипогонадотропный гипогонадизм. Поэтому становится все более актуальным изучение данного гена во всём организме, в частности, в репродуктивной системе самцов.

В данной работе был проведен анализ экспрессии гена *sws* на разных стадиях сперматогенеза методом ПЦР в реальном времени. Показано, что ген *sws* экспрессируется на поздних стадиях сперматогенеза, а именно в ранних и поздних сперматидях. По-видимому, функция *sws* необходима для формирования и созревания сперматозоидов у самцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта КГЦ-ПИЯФ № 075-15-2019-1663.

1. Kretzschmar D. The *Swiss Cheese* Mutant Causes Glial Hyperwrapping and Brain Degeneration in *Drosophila*/ D. Kretzschmar et al. // The Journal of Neuroscience. 1997. № 19 (17). P. 7425-7432.
2. Melentev P. A., Sharapenkov E.G., Surina N.V., et al. *Drosophila* Lysophospholipase Gene *swiss cheese* Is Required for Survival and Reproduction // Insects. 2022. № 1 (13). P. 14.

Изменение экспрессии генов семейства ARL4 при болезни Паркинсона, ассоциированной с мутациями в гене GBA: валидация анализа данных транскриптомного исследования

А.И. Безрукова¹, К.С. Башарова¹, М.А. Николаев^{1,2}, А.Э. Копытова¹, А.К. Емельянов^{1,2}, М.М. Руденок³, М.И. Шадрина³, П.А. Сломинский³, С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.С. Усенко^{1,2}

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

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

³Институт молекулярной генетики НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
УДК: 577

Молекулярные механизмы болезни Паркинсона (БП), ассоциированной с мутациями в гене β-глюкоцереброзидазы (GCase) (GBA-БП), на сегодняшний день остаются неизвестными.

Цель данного исследования заключалась в выявлении потенциальных биомаркеров GBA-БП на основе проведения сравнительного анализа обогащенных путей функциональных групп генов, выявленных в ходе анализа транскриптома клеток черной субстанции (ЧС) головного мозга мышей с 1-метил-4-фенил-1,2,3,6-тетрагидропиридином (МФТП)-индуцированным паркинсонизмом с дисфункцией GCase по средством инъекций селективного ингибитора активности GCase конудритол β-эпоксида (СВЕ) (МФТП+СВЕ) и первичной культуры макрофагов периферической крови пациентов с GBA-БП.

Ранее нами был проведен анализ транскриптома первичной культуры макрофагов периферической крови пациентов с GBA-БП по сравнению с неврологически здоровыми индивидуумами (контроль) [1] и клеток ЧС головного мозга мышей с МФТП+СВЕ по сравнению с контрольной группой мышей с инъекцией NaCl и выявлены дифференциально экспрессирующиеся гены в соответствующих группах сравнения. Сравнительный анализ обогащения функциональных групп генов, выявленных ранее в ходе анализа транскриптомов, проводили с помощью библиотеки Gene Ontology (GO). С целью валидации полученных результатов был оценена экспрессия выявленных генов в лимфоцитах периферической крови (ЛПК) у 14 пациентов с GBA-БП, 14 пациентов с БП и 16 индивидуумов контроля методом количественной ПЦР в режиме реального времени.

В ходе поиска общих метаболических путей в вышеуказанных группах выявлено изменение экспрессии генов семейства ARL4, гена *ARL4C* в группе пациентов с GBA-БП по сравнению с контролем и гена *Arl4d* в группе мышей с МФТП+СВЕ по сравнению с контрольной группой. Продукты этих генов вовлечены в сигнальный путь PI3K-Akt-mTOR, который участвует в регуляции аутофагии, являющейся ключевым звеном в патогенезе БП [2]. В ходе валидации выявленных генов в ЛПК показано снижение экспрессии гена *ARL4C* у пациентов с GBA-БП по сравнению с контролем ($p=0.03$). Уровень мРНК гена *Arl4d* повышен у пациентов с GBA-БП по сравнению с пациентами с БП и контролем ($p<0.05$).

На основе сравнительного анализа транскриптомов клеток крови человека и клеток мозга экспериментальных животных выявлено изменение экспрессии генов семейства ARL4, которые могут быть вовлечены в развитие БП в группе носителей мутаций в гене *GBA*.

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

1. Usenko T., et al. Comparative Transcriptome Analysis in Monocyte-Derived Macrophages of Asymptomatic GBA Mutation Carriers and Patients with GBA-Associated Parkinson's Disease // Genes. 2021. V.12. No 10. 1545.
2. Hou X., et al. Autophagy in Parkinson's Disease // J Mol Biol. 2020. V. 432. No 8. P. 2651-2672.

Определение вторичной структуры белка при помощи алгоритма оценки водородных связей в программном пакете GROMACS

С.В. Горелов^{1,2}, А.И. Титов^{1,3}, А.В. Швецов^{1,2,3}

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия

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

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

УДК: 577

Белки представляют собой биомакромолекулы, участвующие в различных жизненных процессах. В рибосомах происходит синтез белков в виде длинных полипептидных цепей или первичных последовательностей. Освободившись от рибосом, цепи спонтанно складываются, образуя функциональные трехмерные структуры или третичные структуры, которые обычно определяют с помощью таких экспериментальных методов, как: рентгеновская кристаллография, криоэлектронная микроскопия и ядерно-магнитный резонанс, спектроскопия. Однако эти эксперименты часто требуют больших затрат времени и средств. Поэтому очень важно разработать эффективные вычислительные методы для предсказания структуры белка.

Вторичные структуры белков характеризуются как локальные структуры, стабилизированные водородными связями на остоле. Формирование вторичной структуры вызвано стремлением пептида принять конформацию с наибольшим количеством связей между пептидными группами. Тип вторичной структуры зависит от устойчивости пептидной связи, подвижности связи между центральным атомом углерода и углеродом пептидной группы, размером аминокислотного радикала. Все указанное вкуче с аминокислотной последовательностью впоследствии приведет к строго определенной конфигурации белка. В соответствии с различными типами водородных связей обычно выделяют несколько типов структур: α -спираль (H), 3_{10} -спираль (G), π -спираль (I), β -тяж (E), β -мост (B), поворот (T), изгиб (S) и петля (~), среди которых α -спираль и β -тяж определяют главные структурные особенности белка [1].

DSSP (Define Secondary Structure of Proteins) — это алгоритм, применяемый для расчёта и определения вторичной структуры белка. Он использует значения координат атомов белков, для того, чтобы рассчитывать возникающие в полипептиде водородные связи между скелетными атомами. Основываясь на этих водородных связях, алгоритм DSSP производит поиск потенциально возможных вторичных структур для конкретного аминокислотного остатка согласно чётким критериям соответствия шаблонов вторичных структур и назначает их аминокислоте (один из вышеперечисленных вторичных типов структур на одну аминокислоту). Таким образом, формируется полноценная запись вторичной структуры отдельно взятого белка [2].

Данная работа посвящена разработке программы на языке C++, которая, используя алгоритм DSSP, получает на вход данные о структуре белка и геометрии его атомов в трёхмерном пространстве, рассчитывает водородные связи между скелетными атомами в белке и производит поиск паттернов вторичных структур с последующим назначением их аминокислотам. Главной особенностью этой работы является интеграция этой программы с GROMACS - пакетом программ для моделирования физико-химических процессов в молекулярной динамике.

1. Lyu Z, Wang Z, Luo F, Shuai J and Huang Y (2021) Protein Secondary Structure Prediction With a Reductive Deep Learning Method. *Front. Bioeng. Biotechnol.* 9:687426. doi: 10.3389/fbioe.2021.687426.

2. Kabsch W, Sander C. Dictionary of protein secondary structure: pattern recognition of hydrogen-bonded and geometrical features. *Biopolymers.* 1983 Dec;22(12):2577-637. doi: 10.1002/bip.360221211. PMID: 6667333.

Проверка потенциальных ингибиторов неструктурных белков RdRp и 3CL-Pro из SARS-CoV-2

М.С. Биджиева^{1,2}, О.А. Толичева², Д.С. Виноградова², Н.В. Борушко², А.В. Швецов^{1,2},
М.Г. Петухов², А.А. Шалдьян³, В.В. Егоров^{3,4}, А.Л. Коневга^{1,2,5}

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая д. 29

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, НИЦ «Курчатовский институт», 188300, Гатчина, Ленинградская обл., Орлова роща, д. 1

³ ФГБУ «НИИ гриппа им. А.А. Смородинцева», Министерство здравоохранения РФ, 197022, Санкт-Петербург, ул. проф. Попова, д. 15/17

⁴ ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины», Министерство науки и высшего образования РФ

⁵ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», 123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

УДК: 577

Неконтролируемое распространение коронавируса SARS-CoV-2, вызывающего инфекцию COVID-19, является серьезной проблемой, затронувшей миллионы людей по всему миру. Все большее число исследований посвящается разработке противовирусных средств и протоколов лечения заболевших [1,2].

Одним из наиболее эффективных методов предотвращения распространения вируса является нарушение его жизненного цикла [3,4]. Для реализации такого подхода оптимальным является подбор ингибиторов из числа зарегистрированных терапевтических препаратов для белков, обеспечивающих функционирование коронавируса в клетке на начальных этапах его развития.

В качестве белков-мишеней были выбраны два неструктурных белка коронавируса: основная протеаза 3CL-Pro (Nsp5) и полимеразы RdRp (Nsp12) [5,6]. Был проведен виртуальный скрининг соединений из базы данных ZINC с выбранными структурами на способность к их взаимодействию, и отобран ряд соединений, которые обладали минимальной энергией взаимодействия с функциональными сайтами белков-мишеней. Для белков 3CL-Pro и RdRp были разработаны протоколы выделения и очистки с дальнейшим подтверждением их функциональной активности. Далее был проведен анализ взаимодействия подобранных соединений с белками-мишенями методом микротермофореза, а также анализ их ингибирующего действия в экспериментах *in vitro*.

Результаты проделанной работы могут служить основой для дальнейших исследований по разработке методик лечения и препаратов, позволяющих прервать жизненный цикл коронавируса еще до начала этапа сборки новых вирусных частиц в клетке.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-04-60491 “Вирусы”.

1. Woopathi S., Poma A.B., Kolandavel P. Novel 2019 coronavirus structure, mechanism of action, antiviral drug promises and rule out against its treatment // J Biomol Struct Dyn. 2020. P. 1–10.
2. Tse L. v. et al. The Current and Future State of Vaccines, Antivirals and Gene Therapies Against Emerging Coronaviruses // Front Microbiol. 2020. Vol. 11.
3. Kumar S. et al. A multi-targeted approach to identify potential flavonoids against three targets in the SARS-CoV-2 life cycle // Comput Biol Med. 2022. Vol. 142. P. 105231.
4. Malone B. et al. Structures and functions of coronavirus replication–transcription complexes and their relevance for SARS-CoV-2 drug design // Nat Rev Mol Cell Biol. 2022. Vol. 23, № 1. P. 21–39.
5. V'kovski P. et al. Coronavirus biology and replication: implications for SARS-CoV-2 // Nat Rev Microbiol. 2021. Vol. 19, № 3. P. 155–170.
6. Grum-Tokars V. et al. Evaluating the 3C-like protease activity of SARS-Coronavirus: Recommendations for standardized assays for drug discovery // Virus Res. 2008. Vol. 133, № 1. P. 63–73.

Уровень фосфорилированных форм α -синуклеина в тканях мозга мышей с МФТП-индуцированным паркинсонизмом

А.С. Журавлев¹, М.М. Руденок², И.Н. Рыболовлев², А.К. Емельянов^{1,3}, С.Н. Пчелина^{1,3},
П.А. Сломинский², М.И. Шадрина²

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

² *НИЦ "Курчатовский институт" – Институт молекулярной генетики, Москва, Россия*

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

УДК: 57.084.1, 616.858-008.6

Посттрансляционные модификации α -синуклеина играют важную роль в процессе нейродегенерации при болезни Паркинсона (БП). Так для фосфорилированных, нитризированных и окисленных форм данного белка продемонстрирована повышенная агрегационная способность [1]. Обнаружено, что в тельцах Леви доля α -синуклеина составляет более 50% от всех белков и большая его часть фосфорилирована по серину в положении 129 [2].

Целью данной работы явилась оценка уровня фосфорилированных по серину в положении 129 форм α -синуклеина в лизатах тканей мозга мышей с МФТП-индуцированным паркинсонизмом.

Для создания хронической модели БП использовалась комбинация 1-метил-4-фенил-1,2,3,6-тетрагидропиридина (МФТП) и пробеницида [3]. Экспериментальным животным вводили МФТП подкожно в дозе 12 мг/кг в сочетании с пробеницидом в дозе 250 мг/кг внутривентрикулярно, контрольным - 0,9% раствор хлорида натрия. Вывод животных из эксперимента производился через 1 неделю (n=10), 1 (n=10), 1,5 (n=10), 2 (n=10), 3 (n=10) и через 6 месяцев (n=10). Оценка уровня фосфорилированных форм α -синуклеина проводилась с применением метода вестерн-блоттинга.

В результате было обнаружено повышение относительного уровня мономерного фосфорилированного альфа-синуклеина в лизатах тканей стриатума мышей спустя 2 (0,43(0,37÷0,54)) и 6 (0,83(0,78÷0,86)) месяцев после введения МФТП по сравнению с контрольной группой (0,24(0,13÷0,25), p=0,05 и 0,46(0,33÷0,55), p=0,05, соответственно). Также выявлено увеличение относительного уровня олигомерного фосфорилированного альфа-синуклеина в лизатах тканей стриатума мышей спустя 6 месяцев (1,30(1,07÷1,64)) после введения МФТП по сравнению с животными, получающими инъекции данного препарата как в течение 1-го (0,78(0,69÷0,93), p=0,05), так и 3-х месяцев (0,60(0,34÷0,95), p=0,05). Помимо этого, было показано повышение уровня общего фосфорилированного альфа-синуклеина в лизатах тканей стриатума мышей спустя 6 месяцев (2,12(1,93÷2,42)) после введения МФТП по сравнению с животными, получающими инъекции данного препарата в течение 1-й недели (0,66(0,52÷1,24), p=0,05), 1-го (1,02(0,91÷1,19), p=0,05) и 3-х месяцев (0,75(0,56÷1,26), p=0,05). Полученные данные позволяют предположить, что развитие симптомов паркинсонизма у мышей вследствие введения МФТП сопровождается изменением уровня как мономерных, так и олигомерных фосфорилированных форм альфа-синуклеина в тканях стриатума.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №20-15-00262

1. Hodara R. et al. Functional consequences of alpha-synuclein tyrosine nitration: diminished binding to lipid vesicles and increased fibril formation // J Biol Chem. 2004. V. 279 N. 46. P. 47746-44753.
2. Pajarillo E. et al. The role of posttranslational modifications of α -synuclein and LRRK2 in Parkinson's disease: Potential contributions of environmental factors // Biochim Biophys Acta Mol Basis Dis. 2019. V. 1865 N. 8. P. 1992-2000.
3. Petroske E. et al. Mouse model of Parkinsonism: a comparison between subacute MPTP and chronic MPTP/probenecid treatment. // Neuroscience. 2001. V. 106. N. 3. P. 589-601.

Участие генов *RAD30* и *ASF1* в контроле УФ-индуцированного мутагенеза у дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*

И.И. Скобелева¹, В.Г. Королев^{1,2}

¹ ФГБУ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), г. Гатчина, Российская Федерация

² «Курчатовский геномный центр – ПИЯФ», Гатчина, Россия

УДК 575.113

Репликация ДНК должна происходить с высокой точностью, с целью сохранить геном в наиболее стабильном состоянии. В процессе репликации ДНК репликативная вилка может столкнуться с повреждением на матричной ДНК, что приводит к остановке репликативного комплекса. Для продолжения репликации клетки используют механизм обхода повреждений ДНК, чтобы полностью воспроизвести геном [1]. Проблема изучения воздействия малых доз мутагенов на живые организмы актуальна, в связи с тем, что биологические эффекты малых доз в научной литературе описаны в основном феноменологически и с невысокой достоверностью.

Клетки в ответ на повреждения ДНК используют сеть сигнальных переносчиков, управляющих прохождением клеточного цикла (чекпойнт) и эффективностью процесса репарации. Ген *RAD30* кодирует репарационную полимеразу Pol η , которая играет большую роль в контроле репарационного мутагенеза. В литературе была найдена информация, что одиночный *rad30* мутант при малых дозах УФ-излучения показывает более высокий уровень мутагенеза, чем дикий тип.

В нашей лаборатории было показано, что этот мутант при высоких дозах УФ показывает уровень УФ-индуцированного мутагенеза ниже, чем дикий тип [2]. В рамках серии экспериментов, поставленных для изучения УФ-индуцированного мутагенеза при малых дозах, было подтверждено, что при малых дозах УФ-облучения, мутант *rad30* демонстрирует действительно мутагенез выше, чем у дикого типа.

Ген *ASF1* многофункциональный белок, играющий роль в сборке хроматина, регуляции активности киназы Rad53 и стабилизации репликативного комплекса. В нормальных условиях роста белок Asf1 находится в комплексе с Rad53, что дезактивирует оба белка. При переходных дозах от малых к большим наблюдается диссоциация этого комплекса и активация обоих белков. Одиночный мутант *asf1* не проверялся при малых дозах, на данный момент, в литературе отсутствуют данные о его мутагенезе. Мы показали, что при малых дозах УФ одиночный мутант *asf1* не отличается от дикого типа, как и при высоких дозах, что было показано ранее в нашей лаборатории. Как видно из результатов, полученных нами, при переходной дозе 20 Дж/м² мы не наблюдаем достоверного отличия мутагенеза у двойного мутанта *asf1rad30* от одиночного *asf1*, что свидетельствует о том, что в мутация *asf1* эпистатирует к мутации *rad30*. Этот результат можно объяснить тем, что мутация *asf1* при использованной дозе приводит к значительно большей активации киназы Rad53, чем в клетках дикого типа, и мы наблюдаем эффект мутации *rad30*, аналогичный эффекту при больших дозах УФ. Таким образом, можно сделать вывод, что при малых дозах мутагена белок Asf1 ответственен за УФ-индуцированный мутагенез, опосредованный отсутствием активного гена *RAD30*.

1. Friedberg Suffering in silence: the tolerance of DNA damage. [Журнал]. - [б.м.] : Nat Rev Mol Cell Biol, 2005 г.. - Т. 6. - стр. 943–953.
2. Е. А. Alekseeva Т. А. Evstyukhina, V. Т. Peshekhonov, V. G. Korolev 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 [Журнал] // Current Genetics. - 2021 г.. - Т. 67. - стр. 141–151.

Исследование функциональных элементов гибридной микросистемы выделения и очистки бактериальных магнетосом для биомедицинского применения

Н.О. Ситков^{1,2}, К.Г. Гареев^{1,2}, Т.М. Зими́на^{1,2}, К.Е. Брусина¹, Р.Б. Тагаева², В.В. Козяева^{2,3},
Д.С. Груздев⁴, В.С. Федоров², М. А. Шевцов²

¹ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) (СПбГЭТУ «ЛЭТИ»), Санкт-Петербург

² Институт цитологии Российской академии наук (ИНЦ РАН), Санкт-Петербург,

³ Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук» (ФИЦ Биотехнологии РАН), Москва

⁴ SciBear OU, Таллин

УДК: 53.072.12:53.043:53.093

В настоящее время значительный интерес применения в онкотерапии вызывают магнитные наночастицы (МНЧ), как биогенного, так и синтетического происхождения [1,2]. Одним из перспективных направлений применения МНЧ в онкологии *in vivo* является доставка противораковых препаратов к опухоли, что позволяет существенно снизить их токсическую нагрузку на организм. Современные методы выделения магнетосом включают ультразвуковой, химический или механический лизис с последующим сбором с помощью магнита. Эти методы являются достаточно трудозатратными и длительными, а также зависят от квалификации персонала. Поэтому для решения данной задачи предлагается использовать подход на основе микрофлюидных аналитических систем. Разработка и создание высокоэффективных микрофлюидных систем разделения и концентрирования магнетосом помимо развития принципов масштабирования базовых процессов при переходе к микро- и наноразмерам требуют интеграции технологий объектов неорганической и органической природы [3]. Имплементация стандартных технологий микро- и наносистемной техники позволяет реализовать в микрофлюидной матрице блочно-модульную систему с набором интегрированных функциональных компонентов. В данной работе представлены отдельные функциональные узлы, предназначенные для создания такой системы. Микроузел ультразвуковой дезинтеграции МТБ реализован на основе прецизионного зонда, сопряженного с микрофлюидной системой, рельеф которой сформирован из пленочного фоторезиста Ordyl FP440. При разработке диэлектрофоретического узла определена геометрия электродов, позволяющая осуществлять локальное концентрирование микропробы на электродах, определены необходимые для работы системы частоты и напряжения. Интегрированный магнитофоретический микроузел реализован с использованием постоянных магнитов и планарных магнитопроводов, позволяющих локализовать воздействие внешнего магнитного поля на наночастицы. Изготовленные узлы протестированы на модельных микроорганизмах и МНЧ. Использование многоканальных микрофлюидных систем является перспективным инструментом для высокопроизводительного выделения и отбора искомым клинически значимых фракций магнетосом и может быть реализовано на основе стандартных процессов микро- и нанотехнологии.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-15-00240.

1. Gareev K. G. et al. Biomimetic Nanomaterials: Diversity, Technology, and Biomedical Applications // Nanomaterials. 2022. Vol. 12. No. 14. P. 2485.
2. Zimina T. M. et al. Biosensors and drug delivery in oncotheranostics using inorganic synthetic and biogenic magnetic nanoparticles // Biosensors, 2022, accepted for publication.
3. Зими́на Т. М., Лучинин В. В. Миниатюрные аналитические платформы: ожидания, реальность и перспективы // Наноиндустрия. – 2010. – №. 5. – С. 80-89.

Биофизика, биомедицина, генетика



Синтез многослойных эмульсионных капсул с биоминерализацией оболочки

А.П. Чистяков¹, А.В. Бусленко², М.А. Ванцян²

¹*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Московская область, Долгопрудный, Россия*

²*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
УДК: 544.77*

Адресная доставка лекарств - активно развивающаяся область медицины. Транспорт лекарственных веществ непосредственно в обозначенную область организма, ткань, орган или клетки позволяет снизить их токсичность, улучшить эффективность и уменьшить количество используемого активного вещества [1-3]. Возможным носителем адресной доставки могут выступать капсулы из сверхтонких пленок. Метод layer-by-layer (ЛБЛ) хорошо подходит для создания таких капсул из-за отсутствия ограничений на размер или форму субстрата, к тому же не требуется использования высокой температуры или давления [2]. Включение неорганических слоев в состав оболочки способствует повышению ее механической прочности.

В качестве ядра капсул использовали капли масла ши. Многослойную оболочку формировали из полиэлектролитов - полиаллиламин гидрохлорида (РАН) и полистиролсульфоната натрия (PSS), которые впоследствии будут заменены на другие, более биосовместимые полиэлектролиты, например, гиалуроновую кислоту и хитозан. С целью получения биоминерализованных структур оболочку модифицировали слоем карбоната кальция, синтезированным при помощи кристаллизации из растворов хлорида кальция (CaCl_2) и карбоната натрия (NaCO_3).

Полученные капсулы исследовали методами динамического светорассеяния, оптической и электронной микроскопии, что позволило оценить влияние количества полиэлектролитных слоев, концентрации растворов, времени выдержки системы на размер и морфологию капсул, их устойчивость.

В работе использовано оборудование Ресурсного центра оптической микроскопии и спектроскопии НИЦ «Курчатовский институт».

Исследование выполнено при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт», Приказ № 2180 от 18.08.2022 г.

1. Tewabe A. et al. Targeted Drug Delivery — From Magic Bullet to Nanomedicine: Principles, Challenges, and Future Perspectives // J Multidiscip Healthc. 2021. V. 14. P. 1711–1724
2. Park S. et al. Layer-by-layer assembled polymeric thin films as prospective drug delivery carriers: design and applications // Biomaterials Research. 2018. V. 22.
3. Burmistrov I.A. et al. Permeability of the Composite Magnetic Microcapsules Triggered by a Non-Heating Low-Frequency Magnetic Field // Pharmaceutics. 2021. V.14.

Влияние эффектов, связанных с локальными концентрациями ионов солей, на измеряемые параметры в малоугловом рассеянии нейтронов

Н. С. Иванова^{2,4}, А. И. Титов^{2,3}, А. В. Швецов^{1,2,3,4}

1 – Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина

2 – Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина

3 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

4 – Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург

Способность белков к выполнению своих функций определяется их молекулярным окружением и может быть утрачена в отсутствие воды и ионов. Роль гидратной оболочки, представляющей собой слой воды у поверхности белка со специфической для его структуры локализацией, хорошо изучена. Также известно, что в малоугловом рассеянии нейтронов и малоугловом рентгеновском рассеянии плотность длин рассеяния слоя воды, принадлежащего гидратной оболочке исследуемого белка, отлична от плотности длин рассеяния невзаимодействующих с белком слоёв [1]. Значимость вклада ионной оболочки белка в получаемые кривые малоуглового рассеяния до сих пор не была установлена, в связи с чем была поставлена задача оценить влияние ионов в различной концентрации на параметры кривых. С помощью веб-сервера N++ были подготовлены системы с двумя небольшими белками, широко используемыми в лабораторной практике – бычьим сывороточным альбумином и лизоцимом курицы в различных зарядовых состояниях (положительный заряд системы, изоэлектрическая точка, отрицательный заряд системы). Для этих систем с использованием пакета программ GROMACS были получены траектории молекулярной динамики при концентрациях ионов натрия и хлора, составляющих 0.1 моль/л, 0.5 моль/л и 1.0 моль/л. Далее траектории были подвергнуты обработке с помощью разработанного нами алгоритма, реализованного в виде программы на языке C++, производящей расчёт сеток плотности длин рассеяния с помощью трёхмерных гауссовых функций. По полученным сеткам были рассчитаны кривые малоуглового рассеяния нейтронов в H₂O и D₂O. Из данных малоуглового рассеяния в программе SASfit рассчитаны радиусы гирации, соответствующие рассматриваемым системам. Визуализация полученных сеток плотности длин рассеяния продемонстрировала увеличение числа сайтов с высокой вероятностью локализации ионов при росте концентрации соли и изменение их топологии у поверхности белка в зависимости от зарядового состояния системы. Расчётные значения радиусов гирации в H₂O были выше, чем в D₂O, что соответствует известным экспериментальным данным [2], а также для систем с H₂O изменения значения радиуса гирации в зависимости от других параметров системы (зарядовое состояние, концентрация) оказались менее существенными, чем для систем с D₂O. Также отмечено влияние количества титруемых групп белка на величину изменения радиуса гирации: для лизоцима курицы различия радиусов гирации при изменяющихся параметрах системы менее значительны, чем для бычьего сывороточного альбумина. В одинаковых зарядовых состояниях присутствует зависимость радиуса гирации от концентрации соли. При одинаковых концентрациях радиус гирации минимален для систем в изоэлектрической точке.

Литература.

1. Merzel F., Smith J. C. Is the first hydration shell of lysozyme of higher density than bulk water? // Proceedings of the National Academy of Sciences.—2002.—Т. 99, № 8. — С. 5378–5383. — DOI: 10.1073/pnas.082335099

2. Svergun D. I., Richard S., Koch M. H. J., Sayers Z., Kuprin S., Zaccai G.

Protein hydration in solution: Experimental observation by x-ray and neutron scattering // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 1998. — Т. 95, № 5. — С. 2267–2272.— DOI: 10.1073/pnas.95.5.2267.

Аллельные варианты N2081D и M1646T гена *LRRK2* ассоциированы с накоплением сфинголипидов в крови у пациентов с болезнью Паркинсона

К.С. Башарова¹, А.И. Безрукова¹, К.А. Сенкевич², Г.В. Байдакова⁴, И.В. Милюхина^{2,3},
А.А. Тимофеева², Е.Ю. Захарова⁴, С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.С. Усенко^{1,2}

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

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

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

⁴Медико-генетический научный центр имени академика Н.П. Бочкова, Москва, Россия
УДК: 577

Болезнь Паркинсона, ассоциированная с мутациями в гене *LRRK2* (*LRRK2*-БП), - распространённая форма болезни Паркинсона (БП) с известной этиологией. Функции обогащенной лейциновыми повторами киназы 2 (*LRRK2*), кодируемой геном *LRRK2*, до конца не исследованы, как следствие, молекулярные механизмы развития *LRRK2*-БП неизвестны. Данные анализа липидома спинномозговой жидкости указывают на изменение уровня сфинголипидов у пациентов с *LRRK2*-БП по сравнению с контролем [1]. Аллельные варианты N2081D и M1646T гена *LRRK2* ассоциированы с активностью фермента глюкоцереброзидазы (GCase), который расщепляет сфинголипид глюкоцереброзид [2]. Неизвестно ассоциированы ли данные варианты с метаболизмом сфинголипидов у пациентов с БП. Целью данной работы заключалась в оценке влияния вариантов N2081D и M1646T гена *LRRK2* на активность лизосомных ферментов и концентрацию их субстратов в крови пациентов с БП. Скрининг аллельных вариантов M1646T и N2081D гена *LRRK2* проводился в группе пациентов с БП (N=580) и в контроле (N=452) сопоставимых по полу и возрасту разработанным нами методом ПЦР с последующим рестрикционным анализом. Активности лизосомных ферментов (GCase, альфа-галактозидаза (GLA), кислая сфингомиелиназа (ASMase), галактозилцереброзидазы (GALC)) и концентрации сфинголипидов (глоботриаозилсфингозин (LysoGb3), сфингомиелин (LysoSM), сфингомиелин-509 (Lyso509), гексозилсфингозин (HexSph)) оценивали в крови методом высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией (ВЭЖХ-МС/МС). Нами показано, что носительство аллельного варианта M1646T увеличивает риск БП в 2.24 раза (95% CI:1.12-4.83, p=0.023), а N2081D в 1.89 раза (95% CI:1.073-3.33, p=0.028) в Северо-Западном регионе России. Была выявлена тенденция к снижению активности ферментов GALC и ASMase в группе пациентов с БП, являющихся носителями варианта N2081D (N2081D-БП), по сравнению со сБП (p=0.052, p=0.06, соответственно). Пациенты с N2081D-БП характеризовались повышенной концентрацией LysoGb3 по сравнению с пациентами со сБП и контролем (p=0.02, p=0.011, соответственно) и LysoSM по сравнению со сБП (p=0.013). Концентрация Lyso509 была повышена у пациентов с БП, являющихся носителями варианта M1646T (M1646T-БП), по сравнению с контролем (p=0.04). Статистически значимых различий в активности GCase, GLA и концентрации HexSph между исследуемыми группами выявлено не было (p>0.05). В данном исследовании впервые было показано, что аллельные варианты N2081D и M1646T гена *LRRK2* ассоциированы с риском БП в Северо-Западном регионе России, а также с повышенной концентрацией сфинголипидов в крови в группе пациентов с БП.

Исследование поддержано грантом РНФ №22-25-00501.

1. Jasmin Galper et al. Lipid pathway dysfunction is prevalent in patients with Parkinson's disease, *Brain*, 2022; awac176.
2. Sosero YL et al. *LRRK2* p.M1646T is associated with glucocerebrosidase activity and with Parkinson's disease. *Neurobiol Aging*. 2021 Jul;103:142.e1-142.e5.

Применение хемометрических методов для классификации образцов больных онкогематологическими заболеваниями

Р.В. Бутяев¹, Л.В. Плотникова¹, А.М. Поляничко¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
УДК: 543.421/.424; 519.25

На сегодняшний день такие онкогематологические заболевания, как множественная миелома (ММ) и хронический лимфолейкоз (ХЛЛ) остаются неизлечимыми. Ранее нами был предложен подход выявления характерных признаков ММ в спектрах ИК поглощения сыворотки крови, основанный на анализе вторичной структуры белков сыворотки крови человека [1], [2]. В настоящей работе анализ ИК спектров проводили с использованием двух хемометрических методов классификации – методом главных компонент (МГК) и методом SIMCA.

В работе были получены и проанализированы ИК спектры 50-ти образцов сыворотки крови больных ММ, больных ХЛЛ и здоровых доноров, находящихся под наблюдением гематологической клиники Российского НИИ гематологии и трансфузиологии (г. Санкт-Петербург). Регистрацию ИК спектров проводили с помощью Фурье спектрометра Nicolet 8700 (ThermoFisher) в диапазоне 4000-650 см⁻¹ с разрешением 2 см⁻¹ и усреднением по 128 накоплениям. В работе использовали образцы в виде таблеток KBr, приготовленные на основе лиофильно высушенных препаратов сыворотки крови. Для анализа спектров были реализованы два алгоритма классификации – МГК и SIMCA.

Метод главных компонент сокращает размерность матрицы, составленной из набора спектральных данных, и позволяет представить набор спектров в виде набора точек в пространстве главных компонент. После применения метода к имеющимся спектральным данным мы получили разделение набора точек на две практически не пересекающиеся группы на графике зависимости третьей главной компоненты от пятой. Это разделение, вероятнее всего, происходит по признаку наличия или отсутствия у пациентов диагноза ММ. Данный подход позволяет оценить принадлежность образца к группе больных ММ по близости точки, соответствующей этому образцу, к группе точек ММ в пространстве главных компонент.

Метод SIMCA использует в своей основе МГК, но с его помощью можно делать оценки о принадлежности к той или иной группе без проведения визуального анализа. В SIMCA для определения принадлежности точки к какой-либо группе используется численный статистический параметр, поэтому анализ возможно проводить автоматически, без участия человека. С помощью этого метода, в данной работе, мы провели обучение алгоритма, который в последствии смог верно классифицировать контрольные образцы пациентов с диагнозом ММ и здоровых доноров.

Таким образом, и МГК, и SIMCA могут быть использованы для классификации спектров сыворотки крови, а значит их возможно использовать для оценки наличия рассмотренных онкогематологических заболеваний.

Работа выполнена при поддержке Научного парка СПбГУ («Оптические и лазерные методы исследования вещества» «Центр диагностики функциональных материалов для медицины фармакологии и нанoeлектроники», «Криогенный отдел»). Авторы выражают признательность сотрудникам гематологической клиники Российского научно-исследовательского института гематологии и трансфузиологии (г. Санкт-Петербург, Россия) за любезно предоставленные образцы сыворотки крови.

1. Тельная Е. А. и др. Инфракрасная спектроскопия сыворотки крови больных онкогематологическими заболеваниями // Биофизика. 2020. Т. 65. № 6. С. 1154-1160.
2. Mikhailets E.S. et al. Protein secondary structure analysis of serum from patients with oncohematological diseases // Journal of Physics Conference Series. 2021. V. 2103. No. 1. P. 012053.
3. Родионова О. Е., Померанцев А. Л. Хемометрика в аналитической химии // ИХФ РАН. – 2006.

Терморубин нарушает термодинамическую метастабильность элонгирующей рибосомы

А.А. Грачев^{1,2}, О.А. Толичева¹, Е.В. Полескова^{1,2}, А.Л. Коневга^{1,2,3}

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

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

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

УДК: 577

Синтез белка – это сложноорганизованный многокомпонентный процесс, принципиально важный для обеспечения жизнедеятельности организма. В связи с этим ингибирование одного или нескольких этапов трансляции прокариот является эффективным механизмом действия многих антибактериальных препаратов [1]. Однако повсеместное применение антибиотиков, зачастую излишнее, приводит к снижению их терапевтической эффективности, вследствие возникновения устойчивых штаммов бактерий. Поэтому изучение механизма действия неиспользуемых природных соединений с бактерицидной или бактериостатической активностью является одной из важнейших задач современной биологии. Терморубин – вторичный метаболит *Thermoactinomyces antibioticus*, нарушающий работу системы биосинтеза белка как грамположительных, так и грамотрицательных бактерий. Тем не менее точный молекулярный механизм ингибирования до сих пор неизвестен. Используя реконструированную *in vitro* систему трансляции *E. coli*, мы показали, что добавление терморубина негативно влияет на парциальные реакции цикла элонгации. Так, для терморубин-содержащих рибосомных комплексов было продемонстрировано снижение скорости аккомодации аминоацил-тРНК в А сайт, нарушение эффективности образования первой пептидной связи и повышение скорости транслокации пептидил-тРНК из А сайта в Р сайт. Также мы установили, что терморубин дестабилизирует пептидил-тРНК в А сайте. Из аппроксимации уравнением Аррениуса следует, что связывание терморубина с рибосомой стимулирует диссоциацию пептидил-тРНК путем снижения энергетического барьера. Суммируя наши данные и тот факт, что связывание терморубина вызывает изменение положения оснований А1913 и С1914 23S рРНК [2], можно предположить, что механизм действия данного антибиотика связан с термодинамическим нарушением метастабильного взаимодействия тРНК и А сайта транслирующей рибосомы.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 22-14-00278).

1. Arenz S., Wilson D. N. Bacterial protein synthesis as a target for antibiotic inhibition //cold spring harbor perspectives in medicine. – 2016. – Т. 6. – №. 9. – С. a025361.
2. Bulkley D., Johnson F., Steitz T. A. The antibiotic thermorubin inhibits protein synthesis by binding to inter-subunit bridge B2a of the ribosome //Journal of molecular biology. – 2012. – Т. 416. – №. 4. – С. 571-578.

Молекулярно-генетические маркеры инсулинорезистентности и сахарного диабета 2 типа

К.В. Драчева^{1,2}, И.А. Побожьева^{1,2}, К.А. Анисимова², З.М. Хамид², С.Г. Баландов², Д.И. Василевский², С.Н. Пчелина^{1,2}, В.В. Мирошникова^{1,2}

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

²Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет имени академика И.П. Павлова Министерства здравоохранения Российской Федерации, г. Санкт-Петербург

УДК: 577

Сахарный диабет 2 типа (СД2) часто развивается на фоне абдоминального ожирения [1]. При этом, дисбаланс секреции адипоцитокинов и снижение чувствительности жировой ткани (ЖТ) к глюкозе играют важную роль в развитии дисфункции ЖТ и инсулинорезистентности, что рассматривается как ключевое звено патогенеза СД2 при ожирении [2].

Целью данной работы является изучение паттерна экспрессии генов, участвующих в регуляции секреции адипоцитокинов и инсулино-зависимого поглощения глюкозы - *SLC2A4*, *ADIPOQ*, *LEP*, *IL6* - в подкожной и висцеральной жировой ткани (ПЖТ и ВЖТ) у пациентов с ожирением и СД2; оценка корреляции уровня экспрессии исследуемых генов с биохимическими параметрами обмена глюкозы.

Материалы и методы. Образцы ПЖТ и ВЖТ были получены при проведении бариатрических операций (N=53, ИМТ>35): 26 пациентов с СД2, 27 – без СД2; а также у лиц без ожирения при плановых операциях на брюшной полости (контрольная группа, N=15, критерии включения: ИМТ<30, нормогликемия). Уровни мРНК исследуемых генов в ЖТ оценивали методом ПЦР в реальном времени. Статистический анализ выполнялся в среде R-Studio с использованием встроенных пакетов R версии 4.2.1.

Результаты. Уровень мРНК гена *SLC2A4* в ПЖТ был снижен у пациентов с ожирением и СД2 по сравнению с контрольной группой (p=0.003), отрицательно коррелировал с концентрацией глюкозы (r=-0.318, p=0.016) и триглицеридов (ТГ) (r=-0.392, p=0.010) в плазме крови. Уровень мРНК гена *ADIPOQ* в ПЖТ и ВЖТ также был снижен у пациентов с ожирением и СД2 в отличие от контрольной группы (p < 0.05), при этом наблюдалась положительная корреляция между уровнем мРНК гена *ADIPOQ* в ПЖТ и ВЖТ (r = 0.382 и p = 0.002). Уровень мРНК гена *ADIPOQ* в ПЖТ отрицательно коррелировал с окружностью талии (r=-0.435, p=0.006) и уровнем ТГ в плазме крови (r=-0.450, p=0.002). С-пептид, который является показателем секреции инсулина и одним из диагностических маркеров СД2, отрицательно коррелировал с уровнем мРНК *SLC2A4* в ПЖТ и ВЖТ (r=-0.367, p=0.035; r=-0.393, p=0.022, соответственно) и *ADIPOQ* в ВЖТ (r=-0.401, p=0.019). Уровень мРНК гена *LEP* в ПЖТ и ВЖТ не отличался у пациентов с ожирением и СД2 и контрольной группой. Уровень мРНК гена *IL6* в ПЖТ был выше у пациентов с ожирением и СД2 в отличие от контрольной группы (p=0.006).

Одновременное снижение экспрессии генов *SLC2A4*, *ADIPOQ* и повышение экспрессии гена *IL6* в ПЖТ можно рассматривать как потенциальный маркер развития СД2 при ожирении.

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

1. Kahn S. E., Hull R. L., Utzschneider K. M. Mechanisms linking obesity to insulin resistance and type 2 diabetes //Nature. – 2006. – V. 444. – No 7121. – P. 840-846.
2. Catalina M. O. S. et al. New insights into adipokines as potential biomarkers for type-2 diabetes mellitus //Current medicinal chemistry. – 2019. – V. 26. – No. 22. – P. 4119-4144.

Анализ процесса сперматогенеза у особей *Drosophila melanogaster* с нарушенной функцией гена *swiss cheese*

Е.А. Иванова¹, Е.В. Рябова¹, С.В. Саранцева¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

УДК: 575.21

Ген *swiss cheese* (*sws*) *Drosophila melanogaster* (*D. melanogaster*) является эволюционно консервативным, его ортологом у человека является ген *PNPLA6*. Он кодирует фосфолипазу В, которая расщепляет внутриклеточный фосфатидилхолин/лизофосфатидилхолин с образованием глицерофосфохолина и жирных кислот. Мутации в данном гене приводят к развитию обширной нейродегенерации в мозге мух, вследствие чего работа по его изучению была сосредоточена только на нервной системе насекомого [1, 2]. Но, вероятно, у него есть иные потенциально возможные функции в других органах, поэтому была проведена работа по изучению распределения его экспрессии в организме дрозофилы. В частности, высокий уровень экспрессии гена *sws* был зафиксирован в мужской репродуктивной системе, а именно в семенниках. К тому же, у мух, мутантных по данному гену (*sws¹*), были отмечены уменьшение времени ухаживания за самкой и снижение скорости движения сперматозоидов [3]. Поэтому было высказано предположение, что ген *sws* играет определенную роль в сперматогенезе.

В данной работе были использованы особи *D. melanogaster* с мутацией в гене *sws* (*sws¹*) и особи дикого типа (*CantonS*) в качестве контроля. В семенниках были проанализированы следующие параметры: размер семенного пузырька, гемато-тестикулярный барьер, процесс индивидуализации сперматид, а также оценена экспрессия гена *sws* на разных этапах сперматогенеза. В результате работы было обнаружено, что эффекты мутации *sws¹* в сперматогенезе дрозофилы вызывают нарушения дифференцировки сперматид и целостности гемато-тестикулярного барьера, из-за чего образуются нефункциональные сперматозоиды.

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

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.

Эффективность комбинированного лечения препаратами анакинра и ламотриджин в литий-пилокарпиновой модели эпилепсии

А.Д. Калима¹, Д. С. Синяк¹, О.Е. Зубарева¹

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

УДК: 612.8

Эпилепсия – это хроническая патология нервной системы, характеризующаяся рецидивирующими спонтанными судорожными припадками, а также рядом психоэмоциональных и когнитивных нарушений. От эпилепсии страдают более 50 миллионов человек во всем мире, и приблизительно в 30% случаев болезнь устойчива к традиционным противосудорожным лекарствам, что делает актуальным поиск новых методов лечения [1]. Вместе с тем в последние годы широко обсуждается роль нейровоспаления в эпилептогенезе [2], однако перспективы использования препаратов, действующих через этот патофизиологический механизм, остаются малоисследованными.

Целью данной работы является изучение эффективности комбинированной терапии анакинрой (антагонистом рецепторов IL-1) и антиконвульсантом ламотриджином в литий-пилокарпиновой модели височной эпилепсии.

Для индукции эпилептогенеза самцам крыс Wistar в возрасте 8 недель вводили пилокарпин (ПК) в дозе 20-40 мг/кг (в/б) через сутки после инъекции р-ра LiCl (в/б, 127 мг/кг) [3]. Контрольной группе крыс вводили физ. р-р и диметилсульфоксид (DMSO). Затем экспериментальных крыс разделили на 4 группы: в первой опытной группе животных оставляли нелечеными; крысам во второй опытной группе ежедневно вводилась анакинра, растворенная в физ. р-ре, в дозе 100 мг/кг для первых 6 инъекций и 50 мг/кг для последующих 5 инъекций (в/б); в третьей опытной группе вводился ламотриджин, растворенный в DMSO, в дозе 20 мг/кг (в/б); в четвертой группе – комбинация ламотриджина и анакинры в указанных выше дозах. Первую из инъекций делали через час после прекращения судорог, далее лечение производили ежедневно, 1 раз в день в течение 10 дней. Поведенческий тест «Открытое поле» проводился через месяц после введения ПК, в хроническую стадию модели, когда начинают развиваться спонтанные рецидивирующие судороги. В течение всего срока введения препаратов отслеживалась динамика веса и выживаемость животных.

Нелеченые животных характеризовались гиперактивностью, у них значительно увеличивалась общая и локомоторная активность (по показателям общего числа актов и времени локомоции соответственно). Лечение ламотриджином и анакинрой в отдельности оказалось эффективным в снижении времени локомоции, но комбинированная терапия не продемонстрировала значимого эффекта. В группе с ламотриджином также отмечено достоверное снижение числа актов по сравнению с нелечеными животными. Статистически значимых различий между группами леченых и нелеченых крыс в уровне смертности и динамике веса обнаружено не было.

Таким образом, препараты анакинра и ламотриджин эффективны по отдельности для нивелирования гиперактивности крыс в литий-пилокарпиновой модели височной эпилепсии, но в комбинации значимого терапевтического эффекта не наблюдается.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ, грант № 21-15-00430.

1. Perucca E., French J., Bialer M. Development of new antiepileptic drugs: challenges, incentives, and recent advances // *The Lancet Neurology*. 2007. V. 6. P. 793–804.
2. Rana A., Musto A. E. The role of inflammation in the development of epilepsy // *Journal of Neuroinflammation*. 2018. V. 15. P. 144.
3. Curia G. et al. The pilocarpine model of temporal lobe epilepsy // *Journal of neuroscience methods*. 2008. V. 172. P. 143–157.

Особенности построения систем планирования ионной лучевой терапии

Е.В. Парменова¹, О.П. Ющенко¹, В.А. Пикалов¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино, Россия

УДК: 615.849.5 + 615.849.12

Лучевой терапии уже более 100 лет, она является одним из основных методов лечения онкологических заболеваний. За столетие была проделана серьёзная работа по совершенствованию методики лучевой терапии с использованием γ – квантов, электронов, протонов и ионов. После того, как стало понятно, что биология воздействия протонов на живое вещество аналогична действию гамма-излучения, внимание передовых экспериментальных исследований было обращено на ионы, высокие ионизационные потери которых приводят к оказанию более сильного биологического воздействия. Для протонных и ионных пучков характерно то, что выделение энергии растёт с глубиной, достигая Брэгговского максимума, а затем резко уменьшается на расстояниях порядка миллиметра. Такое поведение позволяет локализовать энерговыделение, оказывая максимальное воздействие именно на патологический очаг. Однако эффективность радиотерапии заметно снижается для радиорезистентных опухолей. Практическим решением этой проблемы является облучение сильно ионизирующими частицами, а именно — ионами углерода. Резкий рост ионизации в пике Брэгга приводит к значительным повреждениям молекул ДНК (двунитевым разрывам). В результате патологические клетки прекращают деление и рост опухоли останавливается. Эффективность ионной терапии находится на уровне 80÷90% [1,2].

Использование углеродного пучка накладывает свои особенности на систему планирования. Связано это как с физическими процессами (значительный вклад фрагментации пучка), так и с техническими методами реализации процедуры облучения (использование «карандашного» либо сканирующего пучка). Различные технические решения предполагают специфические способы формирования дозового поля и, соответственно, специальные методы в системе планирования [3].

В докладе представлен обзор характерных особенностей методов формирования дозового поля углеродного пучка и способов реализации системы планирования.

1. H. Tsujii et al., «Carbon Ion Radiotherapy. Principles, Practices and Treatment Planning», Springer, 2013.
2. Центр ионной лучевой терапии [Электронный ресурс] // Официальный сайт института физики высоких энергий имени А.А. Логанова. Режим доступа: http://www.ihep.su/files/Journal_2017_Final_2_05_02_2018.pdf
3. Jung-in Kim et al., «Carbon Ion Therapy: A Review of an Advanced Technology», Prog. of Med. Phys. 31(3), 71-80 (2020).

Взаимодействие гипохлорита натрия с нуклеиновыми кислотами

К.И. Павлова¹, Д.Н. Осинникова², Е.Б. Морошкина³

^{1,2,3}Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия

УДК: 577.323

В организме человека гипохлорит (НОСl) синтезируется ферментом миелопроксидазой (МРО) в местах воспалений и является естественным антибактериальным агентом. Однако при протекании хронических воспалений чрезмерная выработка гипохлорита может привести к повреждению тканей и в том числе к появлению злокачественных новообразований [1].

Ранее проведенные исследования показали, что влияние гипохлорита на структуру нуклеиновых кислот осуществляется посредством хлорирования азотистых оснований с последующим разрушением их циклов [2,3].

В данной работе было исследовано влияние гипохлорита натрия на азотистые основания нуклеиновых кислот в составе двуцепочечной ДНК, отдельных нуклеозидов в растворе и одноцепочечных полинуклеотидов. Исследования проводились методом спектроскопии в УФ и видимой области.

В результате проведенного исследования было установлено, что воздействие гипохлорита на азотистые основания в составе полинуклеотидов более эффективно, чем на азотистые основания в составе отдельных нуклеозидов в растворе. Это позволяет сделать вывод о том, что эффективность воздействия гипохлорита определяется в большей степени взаимодействием азотистых оснований между собой нежели доступностью сайтов хлорирования. Также было подтверждено, что наличие у молекулы ДНК вторичной структуры снижает эффективность воздействия гипохлорита.

1. Eduard Hidalgo, Rosa Bartolome, Carmen Dominguez Cytotoxicity mechanisms of sodium hypochlorite in cultured human dermal fibroblasts and its bactericidal effectiveness//Chemico-Biological Interactions 139 (2002) 265–282, 2002.

2. Walter A. Prutz Hypochlorous acid Interaction with Thiols, Nucleotides, DNA and Other Biological Substrates// Archives of Biochemistry and Biophysics Vol. 332, No 1, August 1, pp 110-120, 1996.

3. Mitsuharu Masuda, Toshinori Suzuki, Marlin D. Friesen, Jean-Luc Ravanat, Jean Cadet, Brigitte Pignatelli, Hoyoku Nishino, and Hiroshi Ohshima Chlorination of Guanosine and Other Nucleosides by Hypochlorous Acid and Myeloperoxidase of Activated Human Neutrophils// The Journal of Biological Chemistry Vol. 276, No. 44, Issue of November 2, pp. 40486–40496, 2001.

**Влияние пиоглитазона на экспрессию провоспалительных и
противовоспалительных цитокинов в клетках мозга крыс в литий-
пилокарпиновой модели височной эпилепсии**

А.И. Рогинская^{1,2}, А.А. Коваленко¹, О.Е. Зубарева¹

1. Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М. Сеченова Российской Академии Наук, г. Санкт-Петербург, Россия

2. Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

УДК: 577.25

Эпилепсия – хроническое неврологическое заболевание, которое характеризуется развитием спонтанных рецидивирующих судорог и различных психоэмоциональных и когнитивных нарушений [1]. Несмотря на проводимые исследования, около 30% пациентов страдают фармакорезистентной формой данного заболевания, используемые противоэпилептические препараты только купируют приступы, не предотвращая хронической эпилептизации мозга, что делает актуальным поиск новых методов терапии.

В последнее время обсуждается возможная роль рецепторов, активируемых пролифератором пероксисом (PPARs) в патогенезе эпилепсии. PPARs – это ядерные транскрипционные факторы, влияющие на многие внутриклеточные каскады, как на периферии, так и в мозге. Агонисты PPARs могут ограничивать нейровоспаление, играющее важную патогенетическую роль при различных видах нейропатологии, включая эпилепсию [2].

Целью данной работы является изучение действия агониста PPAR γ пиоглитазона (PG) на экспрессию генов провоспалительного цитокина интерлейкина-1 β (*Il1b*) и противовоспалительного цитокина антагониста рецепторов интерлейкина-1 (*Il1rn*) в литий-пилокарпиновой модели височной эпилепсии.

Особенностью данной модели является то, что после острых судорог, вызванных введением пилокарпина, у крыс постепенно развивается хроническая эпилепсия, характеризующаяся появлением спонтанных рецидивирующих судорог. Эксперименты выполнялись на крысах самцах Wistar в возрасте 7-8 недель. Экспериментальным животным вводился раствор LiCl (в/б, 127 мг/кг), затем спустя 24 часа - скополамин метил нитрат (в/б, 1 мг/кг), через 30 минут — пилокарпин (в/б, 20-30 мг/кг, по 10 мг/кг до достижения выраженных судорог). Контрольным крысам пилокарпин не вводился. PG вводился в/б курсом: первая инъекция в дозе 7 мг/кг через 75 минут после пилокарпин-индуцированного эпилептического статуса и затем, по 1 мг/кг, 1 раз в день, с интервалом 24 часа, в течение 7 дней, после чего осуществлялся забор мозга для дальнейшего анализа экспрессии генов *Il1b* и *Il1rn* методом ОТ-ПЦР в реальном времени в дорзальном гиппокампе и височной коре.

У крыс, которым вводили PG, быстрее восстанавливался вес тела, который заметно снижается после введения пилокарпина. PG также подавлял гиперактивность и нивелировал нарушения коммуникативного поведения экспериментальных крыс в тестах Открытое поле и Социальный тест. Результаты ОТ-ПЦР в реальном времени показали, что применение PG существенно увеличивало экспрессию антагониста рецепторов интерлейкина-1, как у контрольных, так и экспериментальных животных.

Полученные результаты выявляют противовоспалительные свойства пиоглитазона, что указывает на перспективность его использования в лечении эпилепсии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ N 20-515-00020.

1. Allone C. et al. Neuroimaging and cognitive functions in temporal lobe epilepsy: A review of the literature // J. Neurol. Sci., 2017. Vol. 381. P. 7–15.
2. Wagner N., Wagner K.D. The Role of PPARs in Disease // Cells, 2020. Vol. 9, № 11.

Влияние наночастиц серебра на показатели жизнеспособности нематоды *C. Elegans*

П.Д. Самусева¹, А.А. Мехова¹

¹ ФГБОУ ВО Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

УДК: 615.009-056.2

Среди различных наноматериалов, получивших широкое распространение в последние десятилетия, наночастицы (объекты размером 1-100 нм) представляют особый интерес благодаря их уникальным физико-химическим характеристикам. Особое внимание уделяется наночастицам серебра (НЧС), обладающим выраженными антибактериальными и противовирусными свойствами.[1] НЧС используют в пищевой и текстильной промышленности, в медицине, фармацевтике и многих других отраслях. Считается, хотя это строго и не доказано, что НЧС безопасны для высших эукариот. Однако в водных растворах НЧС являются источником ионов серебра Ag(I), которые изоэлектронны ионам меди Cu(I), что приводит к связыванию Ag(I) с транспортерами Cu(I), встраиванию Ag(I) в купроэнзимы и замещению ионов меди в них. Это может вызывать нарушение баланса меди в организме и способствовать развитию нейродегенеративных и онкологических заболеваний.[2]

Целью данной работы является исследование влияния наночастиц серебра на подвижность и продолжительность жизни нематод *C. elegans* штамма дикого типа N2. *C. elegans* - свободноживущая почвенная нематода, которая благодаря своим ценным для эукариотической модели характеристикам широко используется для исследований в области генетики, биологии развития, токсикологии и т.д. В работе использованы НЧС, полученные путем восстановления серебра из раствора AgNO₃ гидразином в мицеллах, образованных олеатом калия. Кристаллическая природа препарата подтверждена UV/vis-спектроскопией. По данным трансмиссионной электронной микроскопией НЧС имеют сферическую форму и размер 30-40 нм.

Для анализа подвижности нематод синхронизировали на эмбриональной стадии и выращивали на чашках Петри с агаризованной средой NGM с различной концентрацией НЧС (0, 10, 50, 100, 150 и 200 мкг/мл) в течение 3 дней при T=20°C. Затем нематод по отдельности помещали в каплю воды и с помощью камеры, встроенной в микроскоп, записывали движения животных в течение минуты (N=10). Подсчет количества движений нематоды производился с использованием специально разработанного для этих целей программного обеспечения. Для измерения продолжительности жизни нематод так же синхронизировали на эмбриональной стадии на чашках Петри с концентрациями НЧС в среде 0, 25, 50, 75, 100 мкг/мл и инкубировали 3 дня до достижения половозрелости. Затем, чтобы отделить первоначально отобранных для эксперимента животных (N ≥ 20) от их потомства, взрослых нематод пересаживали на свежие чашки в соответствии с концентрациями каждые 2 дня, одновременно подсчитывая количество выживших особей. Результаты экспериментов выявили статистически значимое снижение подвижности и уменьшение продолжительности жизни нематод при концентрациях НЧС в среде ≥10 мкг/мл и ≥25 мкг/мл, соответственно. Кроме того, при относительно высоких концентрациях НЧС у многих особей отмечались задержка в развитии и парализация верхней или нижней части туловища.

1. Siddiqi KS, Husen A, Rao RAK. A review on biosynthesis of silver nanoparticles and their biocidal properties // J Nanobiotechnology - 2018 - 16 – P. 14.
2. Puchkova LV, Brogginini M, Polishchuk EV, Ilyechova EY, Polishchuk RS. Silver Ions as a Tool for Understanding Different Aspects of Copper Metabolism // Nutrients. - 2019 - 11 – P.1364.

Сравнительный анализ поведенческих реакций и морфологических изменений в головном мозге крыс после воздействия ионизирующих излучений с различными физическими характеристиками

Ю.С. Северюхин¹

¹*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

УДК 577.3

Исследование влияния корпускулярных видов излучений на поведение и морфологические изменения в центральной нервной системе является важной задачей космической и медицинской радиобиологии. Решение данной задачи поможет лучше оценить побочные эффекты адронной терапии и риски межпланетных космических полетов.

В докладе будет представлен сравнительный анализ поведенческих реакций и морфологических изменений в головном мозге половозрелых крыс после воздействия гамма-излучения, протонов различных энергий и ионов углерода в дозе 1 Гр.

Установлено, что воздействие протонов с энергией 70 МэВ на головной мозг приводит к снижению двигательной активности крыс, росту относительного числа дистрофических изменений в коре, мозжечке и гиппокампе, развитию амилоидоза в переднем мозге и хроматолизу слоя эпендимоцитов на 30 сутки после облучения. Воздействие ионизирующих излучений с различными физическими характеристиками в одинаковой дозе приводит к снижению рабочей памяти и исследовательского поведения крыс [1]. Поведенческие нарушения, дистрофические и морфофункциональные изменения в гиппокампе, коре и мозжечке зависят от линейной передачи энергии и физических характеристик используемого пучка заряженных частиц. В отдаленные сроки после облучения ионами углерода ^{12}C наблюдается элиминация дистрофических нарушений в мозжечке крыс [2].

1. Severyukhin, Y.S et al. Comparative Analysis of Behavioral Reactions and Morphological Changes in the Rat Brain After Exposure to Ionizing Radiation with Different Physical Characteristics // Cellular and Molecular Neurobiology. 2022. DOI:10.1007/s10571-021-01187-z.
2. Северюхин Ю.С., Буденная Н.Н., Тимошенко Г.Н., Иванов А.А., Красавин Е. А. Морфологические изменения клеток Пуркинье коры мозжечка крыс после облучения ионами углерода ^{12}C // Авиакосмическая и экологическая медицина. 2017. Т.51. №1. с. 46-50.

Gold nanolabels for Raman bioimaging: effect of nanoparticle morphology and coating on optical response

A. I. Shevchuk, V. O. Svinko, A. N. Smirnov and E. V. Solovyeva

Saint Petersburg State University; 7-9 Universitetskaya Emb., St Petersburg, Russia, 199034

УДК: 546.59, 544.7

Nanostructures based on metal nanoparticles find applications in materials science, photonics and biomedicine. Integration of noble metal nanoparticles into bioimaging and therapy is going especially rapidly due to the unique optical properties in the near-infrared window in biological tissues and ability to dissipate a heat resulting from surface excitations. Due to plasmon resonance, the enhancement of electromagnetic field near the surface of noble metal nanoparticles occurs that leads to the amplification of Raman scattering and appearance of intense absorption band, the position and contour of which is determined by the size and morphology of the particles. Gold nanolabels for Raman bioimaging are based on this effect. Cyanine dyes are well suited for using as molecular reporters with plasmonic nanoparticles due to high Raman cross-section and ability to be conjugated to various surfaces [1-2].

In this work, the surface-enhanced Raman scattering (SERS) spectra of cyanine derivatives were studied for the first time. The dyes were adsorbed on gold nanoparticles of various morphologies from traditional spheres and nanorods to unusual nanostars and nanobones. The morphology and size of the studied particles were confirmed by transmission electron microscopy. A close attention was paid to finding the best combination of plasmonic core, dye functional derivative and polymer shell to build a label for SERS imaging with 785 nm laser as one of the most used in medical devices.

Upon laser excitation, the following tendency was found for dyes joined with nanoparticles: the stronger SERS response of dye is observed, the weaker emission is expressed and vice versa. The comparison of SERS intensity of dye from various nanoparticles showed complex dependence on the nanoparticle morphology that is associated with the many factors contribution to it, in particular, specific surface area of particles, curvature of the surface and capping agent bilayer thickness. For gold nanobones, the SERS spectra were recorded for the particles coated with cationic and anionic polyelectrolytes at equilibrium adsorption of dye. Cyanine derivatives that are prone to donor-acceptor interactions with gold have not shown sensitivity to the nature and charge of the shell. For the dyes, interacting with the surface through physical adsorption, the SERS response strongly depends on the polymer coating revealing the changes in the contour that may be due to the orientation of molecule by different fragments towards the oppositely charged surfaces.

Based on the obtained results, the following conclusions can be drawn: nanorods (aspect ratio ≥ 2.6) and nanobones are the most appropriate as plasmonic core and make it possible to obtain the most intense SERS signal. In this case, it should be taken into account that sulfonated dyes can be washed out of the polymer shell due to better water solubility. It was also shown that the preference should be given to amine derivatives of cyanine dyes at design of SERS labels, which are subjected to donor-acceptor interaction with metal surface [3].

This work was supported by Saint-Petersburg State University, project № 92350587. The authors would like to thank the Resource Centres of SPbU: "Optical and Laser Materials Research", "Chemical Analysis and Material Research" and "Interdisciplinary Center for Nanotechnology".

1. Свинко В.О., Шевчук А.И., Смирнов А.Н., Макеева Д.В., Соловьёва Е.В. Оптические метки на основе золотых нанозвёзд для ГКР-картирования тканей с использованием красных медицинских лазеров // Оптика и спектроскопия, 2022, Т. 130, № 10. С. 1590–1595.
2. Feng X., Moy A. J., Nguyen H. T. M., Zhang Y., Zhang J., Fox M. C., Sebastian K. R., Reichenberg J. S., Markey M. K., Tunnell J. W. Raman Biophysical Markers in Skin Cancer Diagnosis // J. Biomed. Opt. 2018. V. 23. P. 1.
3. Solovyeva E. V., Smirnov A. N., Svinko V. O., Strelnikov A. S., Shevchuk A. I., Kazarian S. G., Unraveling a role of molecular linker in nanoparticles self-organization by SERS spectroscopy: comparative study of three aromatic diamines // Coll. Surf. A. 2022. V. 645. No 128881.

Исследование фрактальной структуры деревьев с помощью метода численного Фурье-анализа

О.Д. Шнырков^{1,2}, Е.Г. Яшина^{1,2}, К.А. Пшеничный¹, С.В. Григорьев^{1,2}

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра "Курчатовский институт", Гатчина, Россия*

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

УДК: 519.688, 53.01, 57.018.4, 573.7, 58.085

Понятие «фрактал» ввёл в своей работе Бенуа Мандельброт [1] для описания объектов, которые не удаётся измерить привычными нам мерами (длина, площадь, объём). В работе [2] при помощи моделирования экспериментов по малоугловому рассеянию света с помощью численного преобразования Фурье была разработана классификация фрактальных и нефрактальных объектов. Плоские фракталы были разделены на три класса: массовые - фрагментированность распространена по всему объекту, приграничные - фрагментированность сосредоточена на границе и логарифмические - фрагментированность возникает за счёт иерархической структуры.

Опираясь на классификацию фрактальных объектов, в нашей недавней работе [3] было показано, что боковая проекция взрослого листовного дерева является логарифмическим фракталом. Мы сделали вывод, что при росте и ветвлении дерево подчиняется закону сохранения площади при масштабировании от нескольких метров до нескольких дециметров: суммарная площадь боковой поверхности "дочерних" ветвей равна площади поверхности ветви, из которой они растут. Однако, на огромном количестве экспериментальных кривых рассеяния в области больших переданных импульсов (на малых масштабах) наблюдается кроссовер в другой режим, отличающийся другим показателем степени при масштабировании от дециметров до сантиметров. Такой же режим характерен и для всех изображений молодых деревьев.

Мы предложили математическую модель, отличающую организацию молодых веток и в целом молодых деревьев от строения взрослого дерева и взрослых ветвей. В основе модели положен не закон сохранения площади, как для взрослого дерева, а закон сохранения объёма веток: суммарный объём "дочерних" веток равен объёму ветки, из которой они растут. В своей работе мы также моделируем деревья, подчиняющиеся в процессе своего роста закону сохранения объёма и условию сохранения формы веток, и показываем, что результаты исследования методом численного Фурье-анализа этих моделей хорошо согласуются с результатами исследования боковых проекций молодых деревьев методом численного Фурье-анализа.

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

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature. New York: Freeman, 1983.
2. Pustovoi 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., Pustovoi P.M., Iashina E.G., and Pshenichnyi K.A. Experimental evidence for logarithmic fractal structure of botanical trees// Phys. Rev. E 105, 044412.

Сравнительная характеристика радиочувствительности клеток линии MCF-7, культивируемых в виде прикрепляющейся культуры и в виде маммосфер, к действию гамма- и гамма-нейтронного излучения

В.Г. Шуватова, Ю.П. Семочкина

НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

УДК: 577.346

Современная концепция канцерогенеза предполагает присутствие в злокачественных опухолях малочисленной субпопуляции опухолевых стволовых клеток (ОСК), которые играют ключевую роль в инициации опухолевого процесса и метастазировании [1]. ОСК обладают высокой резистентностью к действию редкоионизирующего излучения [2]. В связи с развитием адронной терапии появился интерес к исследованиям чувствительности ОСК к действию плотноионизирующего излучения. Для исследования влияния различных повреждающих факторов на ОСК разработаны методы обогащения культур этой субпопуляцией опухолевых клеток.

Цель работы – сравнение радиочувствительности клеток аденокарциномы молочной железы человека линии MCF-7, культивируемых в виде прикрепляющейся культуры и в виде маммосфер, к действию γ - и γ, n -излучения.

Клетки линии MCF-7 культивировали в среде DMEM, содержащей 10% фетальной бычьей сыворотки и 50 мкг/мл гентамицина (прикрепляющаяся культура). Культуру маммосфер, обогащенную ОСК, получали при культивировании клеток линии MCF-7 в низкоадгезивных условиях в среде DMEM/F12 без фенолового красного, содержащей EGF 20 нг/мл, bFGF 10 нг/мл, B27 2%, гепарин 4 мкг/мл, инсулин 10 мкг/мл. γ -Облучение клеток проводили на установке «ГУТ-200М» (источник ^{60}Co) в диапазоне доз 1–8 Гр при мощности дозы 0,75 Гр/мин, γ, n -облучение проводили на горизонтальном экспериментальном канале реактора «ИР-8» в диапазоне доз 0,5–2 Гр при мощности дозы 0,06 Гр/мин. Энергетический диапазон нейтронов составлял 0,5–10 МэВ. Через 5 суток после облучения подсчитывали количество клеток в образцах, строили графики зависимости выживаемости клеток от дозы облучения и определяли ОБЭ γ, n -излучения для прикрепляющейся культуры и культуры маммосфер.

Обнаружено, что зависимость выживаемости клеток от дозы γ -излучения была линейной ($y = 2,0 - 0,1x$, $R^2 = 0,97$) для прикрепляющейся культуры и линейно-квадратичной для культуры маммосфер ($y = 2,0 - 0,01x - 0,02x^2$, $R^2 = 0,99$). Тогда как зависимость выживаемости клеток от дозы γ, n -излучения была линейной как для прикрепляющейся культуры ($y = 2,0 - 0,38x$, $R^2 = 0,99$), так и для культуры маммосфер ($y = 2,0 - 0,44x$, $R^2 = 0,99$). Показано, что клетки прикрепляющейся культуры линии MCF-7 обладают высокой чувствительностью к действию как γ -, так и γ, n -излучения. Клетки маммосфер были более устойчивыми к действию γ -излучения, чем клетки прикрепляющейся культуры, но при этом клетки маммосфер оказались чувствительными к действию γ, n -облучения. ОБЭ γ, n -нейтронного излучения, оцениваемая по выживаемости клеток прикрепляющейся культуры, во всем диапазоне исследуемых доз была равна $2,5 \pm 0,2$. ОБЭ γ, n -нейтронного излучения, оцениваемая по выживаемости клеток маммосфер, была выше в области низких доз ($\text{ОБЭ}_{\text{max}} = 18$). С увеличением дозы облучения значение ОБЭ снижалось, но оставалось равным не менее 4. Таким образом, клетки культуры маммосфер, обогащенной ОСК, обладают более высокой чувствительностью к γ, n -излучению, следовательно, γ, n -излучение может быть более эффективным в отношении элиминации ОСК линии MCF-7.

1. Li F. et al. Beyond tumorigenesis: cancer stem cells in metastasis // Cell Research. 2007. V. 17. P. 3–14.
2. Lee S.Y. et al. Induction of metastasis, cancer stem cell phenotype, and oncogenic metabolism in cancer cells by ionizing radiation. // Mol Cancer. 2017. V. 16. № 1:10.

Новое малоинвазивное беспроводное устройство для регистрации ЭЭГ у крыс и его апробация в литий-пилокарпиновой модели височной эпилепсии

Д.С. Сияк¹, Г.А. Буков², В.В. Сизов³, Д.В. Амахин¹, О.Е. Зубарева¹

¹ *Институт эволюционной физиологии и биохимии имени И. М. Сеченова РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация*

² *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация*

³ *Институт экспериментальной минералогии Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация*

УДК: 57.084.1, 57.017.4

Последние исследования показали, что нейровоспаление играет важную роль в патогенезе многих неврологических заболеваний, включая эпилепсию. При регистрации электроэнцефалограммы (ЭЭГ) в экспериментальных моделях этих заболеваний предпочтительным является использование неинвазивных методов регистрации. Однако такие методы применяются редко, поскольку требуют надежного крепления электродов к черепу лабораторных животных, что является сложной задачей. В данной работе мы предлагаем новое минимально инвазивное устройство для беспроводной записи ЭЭГ у крыс. Электроды расположены на поверхности черепа и фиксируются на платформе, которая закреплен на черепе с помощью винтов. Такая конструкция предотвращает загрязнение и повреждение тканей мозга, что особенно важно при работе с экспериментальными моделями неврологических заболеваний, сопровождающихся нейровоспалением. Операция малотравматична, и регистрация ЭЭГ может проводиться уже через 2-3 дня после нее. Высокая надежность крепления электродов позволяет проводить длительную регистрацию. Этот метод регистрации ЭЭГ был опробован на крысах с литий-пилокарпиновой моделью височной эпилепсии.

Пилокарпин (ПК) вводили крысам в возрасте 8 недель в дозе 20-40 мг/кг, i.p. до достижения судорог интенсивностью 4 балла по шкале Racine (1972). За сутки до ПК крысам вводили хлорид лития (127 мг/кг, i.p.), за 1 час до ПК делали инъекции скополамин-метил-бромид (1 мг/кг, i.p.). Через 75 минут после развития 4-х бальных судорог, их останавливали введением диазепама в дозе 10 мг/кг, i.p. Контрольным животным пилокарпин не вводили.

Запись ЭЭГ экспериментальных и контрольных крыс проводилась через 4 месяца после введений пилокарпина в фоновых условиях и с использованием функциональных тестов – ритмической фото и фоностимуляции и депривации сна. Показано, что экспериментальные крысы в интериктальный период отличаются повышенной частотой появления на ЭЭГ спайков. Функциональные пробы увеличивают частоту этих проявлений эпилептиформной активности.

Поддержано грантом РФФ № 21-15-00430.

1. Radtke F.A, Chapman G, Hall J, Syed Y.A. Modulating Neuroinflammation to Treat Neuropsychiatric Disorders // Biomed Res Int. 2017. P. 1–21.
2. Jurcau A, Simion A. Neuroinflammation in Cerebral Ischemia and Ischemia/Reperfusion Injuries: From Pathophysiology to Therapeutic Strategies // Int J Mol Sci. 23. 2021. P. 14.

**Модуляция активности кальциевой АТФазы SERCA оказывает
нейропротекторный эффект на гиппокампальные нейроны в условиях низкой
амилоидной токсичности**

А.В. Раковская¹, Е.И. Пчицкая¹, И.Б. Безпрозванный^{1,2}

¹ Лаборатория Молекулярной Нейродегенерации, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

²Кафедра физиологии, Юго-Западный Медицинский Центр Университета Штата Техас, Даллас, США

УДК: 577.25

Болезнь Альцгеймера (БА) – наиболее распространенное неизлечимое нейродегенеративное заболевание, которое влияет на процессы формирования и хранения памяти. Одна из гипотез о причинах возникновения БА – «кальциевая гипотеза», предполагающая нарушение регуляции механизмов клеточного гомеостаза кальция является основной движущей силой нейродегенерации. С целью поиска подходов для лечения БА была исследована новая терапевтическая мишень – кальциевая АТФаза SERCA, с помощью положительных аллостерических модуляторов (ПАМ) [1]. Ca²⁺-АТФаза SERCA располагается на мембране эндоплазматического ретикула (ЭР) нейронов и активно транспортирует ионы кальция из цитоплазмы в эндоплазматический ретикулум против градиента концентрации. ЭР выполняет роль кальциевого депо, а транспорт через Ca²⁺-АТФазу SERCA является основным механизмом экстракции кальция из цитоплазмы нейрона. Соединения ПАМ не влияют на базальную активность Ca²⁺-АТФазы SERCA, но увеличивают скорость выведения ионов кальция из цитоплазмы при повышенных уровнях его концентрации. Повышение уровней свободного внутриклеточного кальция в нейронах – один из основных патологических признаков болезни Альцгеймера и предполагаемая причина потери синапсов и гибели нейронов при ее развитии. Соответственно, подобные соединения, позволяющие нормализовать внутриклеточную концентрацию кальция, имеют потенциал для использования в качестве нейропротекторных агентов при БА.

Для оценки нейропротекторного потенциала ПАМ первичные гиппокампальные нейроны визуализировались путем проведения кальций-фосфатной трансфекции плазмидой GFP на 7 день культивирования *in vitro* (DIV). На 13-14 DIV в среду для культивации добавлялась олигомерная фракция Аβ до достижения концентрации 0,1 мкМ. На 15-16 DIV, за 24 часа до фиксации, добавлялись четыре различных соединения с конечной концентрацией 0,1 мкМ. Были получены серии конфокальных изображений нейронов на микроскопе Leica TCS SP8 (2048 x 2048 пикселя, разрешение 0,034 мкм/пиксель). Для оценки нейропротекции необходимо оценить размер головки дендритного шипика, поэтому обработка изображений производилась с помощью плагина SpineJ [2] в программе ImageJ.

Показано, что при добавлении Аβ наблюдается снижение размера головки по сравнению с контрольной группой, что согласуется с полученными ранее данными и является характерной чертой модели *in vitro*. В ходе исследований продемонстрировано, что при воздействии трех из четырех тестируемых соединений ПАМ увеличивается головка дендритных шипиков нейронов при добавлении Аβ. Данные результаты позволяют сделать вывод, что ПАМ оказывают нейропротекторный эффект в нейрональной гиппокамповой культуре в условиях низкой амилоидной токсичности, моделирующих БА.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №22-15-00049.

1. Krajnak K., Dahl R. A new target for Alzheimer's disease: A small molecule SERCA activator is neuroprotective *in vitro* and improves memory and cognition in APP/PS1 mice // *Bioorganic Chemistry Letters*. 2018. V. 28, № 9. P. 1591-1594.
2. F. Levet, J. Tønnesen, U. V. Nägerl, and J.-B. Sibarita, «SpineJ: A software tool for quantitative analysis of nanoscale spine morphology» // *Methods*. 2020, V. 174, P. 49–55.

Квантово-химическое моделирование реакций переноса электрона с участием флавина

К. В. Одинцов, Б. Л. Григоренко, Т. М. Домрачева

Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

УДК: 577.332, 577.334, 577.344.2, 544.431.2

Реакции с участием флавинов (производных витамина В2) занимают центральное место в биохимии, что обусловлено способностью флавина выступать в роли донора и акцептора одного или двух электронов при взаимодействии с большим набором молекулярных субстратов [1,2]. Ключевая начальная стадия таких реакций – перенос электрона между изоаллоксазиновым кольцом флавина и молекулой субстрата – приводит к образованию высокореакционных промежуточных соединений, контроль образования и дальнейших превращений которых эффективно осуществляется посредством взаимодействия флавина и субстрата с окружающей их молекулой белка [3]. Теоретические оценки скорости переноса электрона [4], не зависящие от эмпирических параметров, могут в существенной степени помочь в интерпретации экспериментальных данных, полученных для выявления факторов, определяющих специфичность реакций с участием флавинов.

Для описания реакций переноса электрона в докладе предлагается схема расчетов энергий электронных состояний с использованием многоконфигуционных квантово-химических методов. Расчеты были проведены для двух биологических реакций, в которых восстановленный флавин выступает донором электрона для триплетного молекулярного кислорода и фотодимера ДНК. В последнем случае, получены энергии фотоиндуцированного переноса электрона в комплексе, рассчитанном на основании данных РСА [5]. Для состояния, описывающего реагенты, оптимизация геометрических параметров молекулярного комплекса проводилась методом функционала плотности с функционалом PBE0 и поправкой на дисперсионные взаимодействия D3. Описывающие перенос электрона геометрии оптимизировались с использованием метода многоконфигурационного взаимодействия CASSCF. Расчет энергий возбуждения был выполнен методами CASSCF и XMCQDPT2. Энергии электронных состояний использовали для оценок величины энергетического барьера переноса электрона, применяя модель двух пересекающихся гармонических потенциалов. В работе было рассмотрено влияние выбора пространства активных молекулярных орбиталей и учета динамической электронной корреляции на величину энергетического барьера. Для реакции фотоиндуцированного переноса электрона, было оценено влияние водородных связей и ионизированных молекулярных групп.

Предложенный подход и полученные результаты будут использованы для разработки многомасштабных моделей реакций, катализируемых флавино-связывающими ферментами.

Работа выполнена при поддержке РФФ 22-23-00418 и РФФ 22-13-00012

1. Romeo E. et al. Same Substrate, Many Reactions: Oxygen Activation in Flavoenzymes // *Chemical Reviews*. 2018. V. 118. No. 4. P. 1742-1769.
2. Toplak M. et al. The devil is in the details: The chemical basis and mechanistic versatility of flavoprotein monooxygenases // *Archives of Biochemistry and Biophysics*. 2021. V. 698. ART. 108732.
3. Chaiyen P. et al. The enigmatic reaction of flavins with oxygen // *Trends in Biochemical Sciences*. 2012. V. 37. No. 9. P. 373-380.
4. Sumi H., Marcus R. A. Dynamical effects in electron transfer reactions // *The Journal of Chemical Physics*. 1986. V. 84. No. 9. P. 4894-4914.
5. Yamamoto J. et al. Repair of (6-4) Lesions in DNA by (6-4) Photolyase: 20 Years of Quest for the Photoreaction Mechanism. // *Photochemistry and Photobiology*. 2017. V. 93. No. 9. P. 51-66.

Влияние суперпарамагнитных наночастиц оксида железа на радиосенсибилизацию злокачественных глиом при лучевой терапии

Н.Х. Чан^{1,2}, Я.Ю. Марченко¹, В.А. Рыжов¹, А.В. Волницкий^{1,3}, Д.А. Амеркано^{1,3}, Ф.А. Пак^{1,3},
Д.В. Лебедев^{1,3}, А.Л. Коневега^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,3}

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

УДК 577.34

В настоящее время лучевая терапия по-прежнему является основным методом лечения опухолей головного мозга. Идея усиления эффективности лучевой терапии онкологических заболеваний за счет использования наночастиц на основе металлов достаточно широко разрабатывается в последние годы, однако результаты этих исследований крайне противоречивы [1,2,3]. Поэтому изучение действия наночастиц оксида железа (SPIONs) в комбинации с лучевой терапией пока остается актуальной задачей.

Цель данной исследовательской работы - проверка сенсibiliзирующего потенциала SPIONs на клеточных моделях при воздействии гамма-радиацией, облучении протонами и рентгеновским излучением.

Две клеточные линии глиом A172 и GI-Tr предварительно инкубировали с SPIONs в декстрановой оболочке в течение 24 часов. Клетки облучали дозами 0-6 Гр гамма-радиацией (⁶⁰Co источник γ -лучей "Исследователь", НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ), протонами на пике Брэгга (синхроциклотрон СЦ-1000, НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ) и рентгеновским излучением. Жизнеспособность клеток тестировали методом AlamarBlue Assay, а также с помощью подсчета числа образовавшихся колоний клеток, окрашенных кристаллическим фиолетовым.

Результаты показали, что исследуемая модификация SPIONs не проявляет радиосенсибилизирующих свойств при облучении протонами и гамма-излучением. При рентгеновском облучении SPIONs проявляют радиосенсибилизирующие свойства. Этот эффект был зарегистрирован в клетках глиомы A172 и GI-Tr во всем диапазоне использованных поглощенных доз и оказался наиболее выраженным для клеток A172 в промежуточной дозе (2-3 Гр), а для клеток GI-Tr при дозах от 1 Гр.

Исходя из полученных результатов, SPIONs могут быть рассмотрены в качестве радиосенсибилизаторов для определенных доз, типов и энергий источников облучения. Таким образом комбинированное действие как физического процесса увеличения поглощенной дозы вторичным излучением, так и химических и биологических процессов, приводящих к повышению радиочувствительности опухолевых клеток, увеличивают эффективность лучевой терапии.

Работа выполнена в рамках государственного задания (№121060200125-2), а также в рамках грантовой программы поддержки лучших проектов иностранных аспирантур «BIG PhD» в Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого.

1. Бушманов А.Ю., Шейно И.Н., Липенгольц А.А., Соловьев А.Н., Корякин С.Н. Перспективы применения комбинированных технологий в протонной терапии злокачественных новообразований // Медицинская радиология и радиационная безопасность. 2019. Т. 64. № 3. С. 11–18.

2. Kirakli, Esra Korkmaz, et al. Superparamagnetic iron oxide nanoparticle (SPION) mediated in vitro radiosensitization at megavoltage radiation energies // Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. 2018. V. 3. № 315. P. 595-602.

3. Andreo, Pedro, et al. Fundamentals of ionizing radiation dosimetry // John Wiley & Sons. 2017.

Взаимодействие птерина и кластеров золота: теоретическое исследование

П.П. Чеботаев¹, А.И. Кононов¹, А.А. Буглак^{1,2}

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

² Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

УДК: 544.18

Птерины являются низкомолекулярными органическими соединениями, повсеместно распространенными в живых организмах. Птерины служат биомаркерами различных заболеваний, в том числе сердечно-сосудистых [1], онкологических [2] и COVID-19 [3]. В этой связи детектирование птеринов является крайне востребованным для медицины.

Нанокластеры (НК) на основе благородных металлов активно изучаются в последнее десятилетие. Они обладают уникальными физико-химическими свойствами, позволяющими использовать их в составе сенсоров для детектирования биомолекул [4]. В частности, исследование комплексов птерина с золотыми нанокластерами представляется крайне актуальным. Золотые НК отличаются низкой цитотоксичностью и высокой химической стабильностью [5], что выгодно отличает их от кластеров других металлов.

Нами рассчитана энергия взаимодействия для комплексов золотых кластеров, состоящих из $n = 1-6$ атомов и обладающих зарядом $q = 0, +1, +2$ с нейтральным и депротонированным птерином. Для этого использовали метод теории функционала плотности с поправкой Гримме для учета дисперсионных взаимодействий (DFT-D3), а именно функционал PBE с базисным набором def2-TZVP и моделью РСМ для учета влияния воды. Были обнаружены различные сайты связывания, зависящие от заряда и размера НК. Например, для нейтрального птерина N8 является наиболее предпочтительным сайтом взаимодействия с нейтральными и катионными кластерами, в то время как с депротонированным птерином НК предпочтительно связываются по N3 атому. Наиболее высокая энергия взаимодействия была получена для комплексов нейтрального птерина с кластером обладающим $n = 6$ и $q = +2$: 56,9 ккал/моль. и 78,2 ккал/моль для нейтрального и депротонированного птерина, соответственно. Люминесцентное и колориметрическое обнаружение птерина представляется наиболее перспективным при $pH < 8$, поскольку комплекс нейтрального птерина с кластером $n = 5, q = +1$ обладает интенсивным переходом из S0 в S1 в спектре поглощения. Показано, что использование кластеров, обладающих $n = 3, q = +2$ при $pH > 8$ перспективно с точки зрения обнаружения птеринов в водных растворах при помощи рамановской спектроскопии. Таким образом, нами оценена возможность детекции птерина с помощью малых кластеров золота спектральными методами.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 20-73-10029.

1. Pacileo M. et al. The role of Neopterin in cardiovascular disease // *Monaldi Archives for Chest Disease*. 2007. V. 68. P. 68-73.
2. Kośliński P. et al. The metabolic profiles of pterin compounds as potential biomarkers of bladder cancer—Integration of analytical-based approach with biostatistical methodology // *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2016. V. 127. P. 256-262.
3. Hailemichael W. et al. Neopterin: A Promising Candidate Biomarker for Severe COVID-19 // *Journal of Inflammation Research*. 2021. V. 14. P. 245-251.
4. Bai Y. et al. Fluorescent Gold Nanoclusters for Biosensor and Bioimaging Application // *Crystals*. 2020. V. 10. No. 5. P. 357.
5. González-Rosell A. et al. Structure and luminescence of DNA-templated silver clusters // *Nanoscale Advances*. 2021. V. 3. No. 5. P. 1230-1260.

Формирование контактов между кластерами белка Bcl-2 и кластерами рецептора IP3 в мышечных гиппокампальных нейронах *in vivo*

М.Е. Чиграй¹, А.В. Раковская¹, Е.И. Пчицкая¹, Г. Балтынк², И.Б. Безпрозванный^{1,3}

1 Лаборатория молекулярной нейродегенерации, Санкт-Петербургский политехнический институт Петра Великого Университет, Санкт-Петербург, РФ

2 Лаборатория молекулярной и клеточной сигнализации, КУ Левена, Левен, Бельгия

3 Отделение физиологии, Юго-Западный медицинский центр штата Юта, Даллас, США

УДК: 577.24, 577.25

Болезнь Альцгеймера (БА) представляет собой самую распространенную форму деменции: по данным ВОЗ, около 60-70% случаев приходится именно на БА. Несмотря на широкую распространенность данного заболевания, в настоящее время не существует адекватного лечения БА, а причины его возникновения вызывают многочисленные дискуссии.

Однако существуют общепринятые признаки, характерные для болезни Альцгеймера. Одним из таких является нарушение регуляции кальция в нейронах [1]. Вероятно, нацеливание на сигнальные белки Ca²⁺ является многообещающей терапевтической мишенью.

Белки семейства Bcl-2 являются важными модуляторами динамики внутриклеточного Ca²⁺. Антиапоптотический Bcl-2 ингибирует высвобождение Ca²⁺ из эндоплазматического ретикулума (ER) посредством взаимодействия с инозитол-1,4,5-трифосфатным (IP3R) рецептором. Связывание Bcl-2 с IP3R подавляет проапоптотическую передачу сигналов Ca²⁺, указывая на то, что комплекс Bcl-2-IP3R может представлять собой потенциальную терапевтическую мишень при лечении заболеваний, связанных с ингибированием гибели клеток Bcl-2 [2].

В текущих экспериментах была оценена совместная локализация Bcl-2 и IP3R в гиппокампальных нейронах диких мышей и мышей, моделирующих болезнь Альцгеймера (5xFAD). Для этого две группы мышей в возрасте 3 мес. были проинжектированы адено-ассоциированными вирусами, кодирующими белок Bcl-2. Было обнаружено, что оба белка находятся в соме нейронов, преимущественно в виде кластеров, при этом окрашивание срезов мозга на митохондриальный маркер Tom20 показал, что белок Bcl-2 локализуется в митохондриях. Результаты исследований показали, что данные белки характеризуются низким уровнем совместной локализации как в нейронах гиппокампа дикого типа, так и в линии 5xFAD. Для улучшения разрешения изображений была применена экспансионная микроскопия, позволяющая изотропно расширить биологический образец с помощью управляемого химического процесса [3]. Применение данного метода показало, что некоторые кластеры Bcl-2 находятся вблизи кластеров IP3R, таким образом, контактируя с кластерами IP3R1. Это подтверждает данные о том, что эти белки расположены в разных клеточных органеллах, IP3R1 – в ЭР, а Bcl-2 – в митохондриях, где он кластеризуется в местах контакта с ЭР, в так называемых митохондриально-ассоциированных мембранах.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-45-01004.

1. I. Bezprozvanny et al, Neuronal calcium mishandling and the pathogenesis of Alzheimer's disease, Trends Neurosci. 31 (2008) 454–463.
2. Yi-Ping Rong et al., Targeting Bcl-2-IP3 receptor interaction to reverse Bcl-2's inhibition of apoptotic calcium signals, Mol Cell, 31 (2) (2008) 255-265.
3. К.З. Деревцова и др, Применение метода экспансионной микроскопии в нейробиологии, Российский физиологический журнал им. И. М. Сеченова, 107 (2021) 4–5 .

Влияние церулоплазмينا и фибриногена на функциональную активность и биомеханические характеристики нейтрофилов периферической крови

Н.Д. Федорова¹, В.С. Колмогоров³, А.В. Соколов², А.П. Трашков¹, П.В. Горелкин³,
А.С. Ерофеев³, Е.Ю. Варфоломеева¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

²ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург, Россия

³НИТУ МИСиС, Москва, Россия

УДК: 57.053

Нейтрофилы являются ключевыми игроками врожденной иммунной системы, ее первой линией защиты. Различные инфекционные частицы разрушаются нейтрофилами посредством фагоцитоза и последующего каскада реакций, в частности, реакции респираторного взрыва (РРВ). Нейтрофилы генерируют активные формы кислорода (АФК) во время РРВ и используют их для уничтожения захваченных агентов. Крайне важно строго регулировать такой процесс из-за повреждающего воздействия перепроизводства АФК на окружающие ткани.

Исследование, проведенное в НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ [1], показало, что необходимое для нормального течения беременности снижение функциональных свойств нейтрофилов связано с увеличением концентрации белка острой фазы церулоплазмينا в несколько раз по сравнению со здоровыми небеременными донорами. Основываясь на данных этого исследования, было высказано предположение, что другие белки острой фазы воспаления (БОФ) также могут быть вовлечены в модификацию функциональной активности нейтрофилов. В более позднем нашем исследовании было показано влияние фибриногена на РРВ нейтрофилов периферической крови [2].

В этой работе впервые было исследовано влияние церулоплазмينا на биомеханические характеристики нейтрофилов периферической крови с использованием сканирующей ион-проводящей микроскопии, совмещённой с конфокальной; показано снижение жёсткости мембраны нейтрофила при взаимодействии с церулоплазмином. Кроме того, было визуализировано взаимодействие церулоплазмينا и фибриногена с нейтрофилами на мембране последних с использованием конфокальной микроскопии.

1. Varfolomeeva EY et al. Ceruloplasmin decreases respiratory burst reaction during pregnancy. 2016. Free Radic Res. Vol. 50(8), pp. 909-19.
2. 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.
3. Filatov M., Varfolomeeva E., Ivanov E. Flow cytofluorometric detection of inflammatory processes by measuring respiratory burst reaction of peripheral blood neutrophils. Biochem. Mol. Med. 1995. 55(2):116-121.

Снижение жизнеспособности глиом при добавлении ингибитора GANT61 в сочетании с протонным или гамма-облучением

А.В. Гарина^{1,2,3}, А.В. Волницкий^{1,2}, В.С. Бурдаков^{1,2}, Н.Х. Чан^{1,3}, Д.А. Амерканов^{1,2}, Ф.А. Пак^{1,2}, Д.В. Лебедев^{1,2}, А.Л. Коневега^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,2}

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

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

УДК: 577.34

Протонная терапия используется для лечения многих видов злокачественных опухолей. Благодаря свойствам протонов, можно облучать опухоли, труднодоступные для хирургического вмешательства. Протонная терапия обладает принципиальным клиническим преимуществом перед обычной фотонной терапией, связанным с характеристиками распределения глубинной поглощенной дозы протонов.

Глиомы - это инвазивные, быстро прогрессирующие опухоли головного мозга, которые плохо поддаются стандартной терапии. Злокачественная трансформация связана с потерей клеточной дифференцировки. Возможной причиной этого процесса является активация механизмов, поддерживающих стволоподобные свойства клеток. Данные литературы указывают на то, что сигнальный путь Sonic Hedgehog является одним из таких механизмов [1]. Он связан с развитием и делением клеток глиом, а также с устойчивостью к гамма-облучению и миграционной способностью клеток. Поэтому растет интерес к ингибированию пути Sonic Hedgehog в сочетании с лучевой терапией [2]. Целью нашего исследования было изучение потенциала ингибитора GANT61, в качестве радиосенсибилизатора и сравнение потенциальной разницы между протонным облучением и гамма-облучением.

Опухолевые клетки предварительно инкубировали с GANT61 и облучали градуированными дозами 0,5-6 Гр протонами на пике Брэгга на синхроциклотроне СЦ-1000 (энергия: 200 МэВ) НИЦ КИ ПИЯФ. Клетки также облучали дозами 2-6 Грей с использованием ⁶⁰Со источника γ -лучей "Исследователь". В другой группе экспериментов злокачественные клетки сначала облучали теми же возрастающими дозами, затем добавляли ингибитор, чтобы продемонстрировать его аддитивный эффект. Чувствительность к излучению определяли с помощью MTS-теста и анализа колоний.

Применение ингибитора GANT61 имело слабый радиосенсибилизирующий эффект при данных типах облучения. А наблюдаемый аддитивный эффект может быть объяснен биологическим влиянием GANT61 на клеточный цикл опухолевых клеток. Сочетание ингибирования пути Sonic Hedgehog с облучением более эффективно снижало жизнеспособность клеток глиом по сравнению с одним только облучением.

Работа выполнена в рамках государственного задания (регистрационный номер № 121060200127-6)

1. Dahmane N, et al. The Sonic Hedgehog-Gli pathway regulates dorsal brain growth and tumorigenesis // Development. 2001. V. 128 No. 24. P. 5201–12.
2. Chiang MF, et al. Modulation of Sonic hedgehog signaling and WW domain containing oxidoreductase WOX1 expression enhances radiosensitivity of human glioblastoma cells // Exp Biol Med. 2015. V. 240. No. 3. P. 392–9.

Применение метода минископ для количественной оценки нейрональной активности *in vivo*

Е. И. Герасимов¹, Е. И. Пчицкая¹, А. В. Митенев¹, А. И. Ерофеев¹, В. С. Чуканов¹,
О. Л. Власова¹, И. Б. Безпрозванный^{1,2}

¹ - Лаборатория Молекулярной Нейродегенерации, Санкт-Петербургский политехнический институт Петра Великого Университет, Санкт-Петербург, Россия

² - Отделение физиологии, Юго-Западный медицинский центр Техасского университета, Даллас, Техас

УДК: 577.3, 57.085.2, 577.25

Метод миниатюрной флуоресцентной микроскопии дает возможность визуализировать нейрональную активность в интересующей области головного мозга *in vivo* у свободно передвигающегося животного. Использование метода минископа позволяет получать довольно обширную информацию об изменениях как в активности нейронов, так и об их взаимодействии на протяжении записи [1]. Данный подход может позволить обнаружить и зарегистрировать нарушения в активности нейронной сети при различных патологиях на разных стадиях их развития. В частности, использование минископа даст возможность определения функциональных нарушений в области гиппокампа на ранних стадиях заболевания при нейродегенерации, к примеру, при болезни Альцгеймера. Однако анализ полученной информации об активности отдельных нейронов является мало освещенной и актуальной задачей в современной нейробиологии. Для решения данной задачи нашей группой был разработан программный пакет, выполненный на языке программирования Python, который позволит осуществить высокоуровневый анализ данных, полученных минископом.

В текущей работе введение вирусного конструкта GCaMP6-f выполнялось в гиппокамп (AP -2.1, ML +2.1, DV -1.8) 5-месячных мышей линии FVB, и через 3 недели над интересующей областью прикрепляли градиентную линзу. Изменения уровня кальция регистрировались с помощью Miniscope v3 в домашней клетке мыши.

Определение активного состояния нейрона выполняется на основе производных входных сигналов. Для этого на основе статистических данных вычисляется пороговое значение. Нейрон находится в активном состоянии, если производная его сигнала превышает пороговое значение. По выделенным активным состояниям реализован подсчет следующих статистик: количество «активаций клетки» за заданный промежуток времени; доля активных нейронов за определенный промежуток времени; продолжительность времени, когда количество активных клеток выше заранее заданного порогового уровня и т.д. Также строятся карты корреляции [2], которые позволяют оценить «силу» взаимодействия нейронов друг с другом и связность нейронной сети (доля связанных нейронов в зависимости от порогового уровня). Для вычисления корреляции реализован подсчет коэффициента Пирсона по интенсивности исходного сигнала и по производной интенсивности.

Разработанный инструмент обеспечит возможность высокоуровневой обработки данных, полученных минископом. В наших будущих исследованиях эти количественные параметры нейронной сети найдут применение при сравнении активности нейронов гиппокампа мышей дикого типа и мышинных моделей болезни Альцгеймера в поведенческих тестах.

Работа выполнена при поддержке грантом РФФИ № 22-15-00049 (ИБ).

1. Герасимов Е. И. и др. Применение Минископа Для Визуализации Активности Нейронов Гиппокампа // Журнал Эволюционной Биохимии И Физиологии. 2020. Т. 56. № 7. С. 560–561.
2. Erofeev A. I. и др. NeuroInfoViewer: A Software Package for Analysis of Miniscope Data // Neurosci. Behav. Physiol. 2021. Т. 51. № 8. С. 1199–1205.

**Сборка и аннотация митохондриального генома дальневосточного вида
*Actinidia arguta***

**М.В. Гладышева-Азгари¹, Ф.С. Шарко¹, Н.В. Слободова¹, С.В. Цыганкова¹, Е.С. Булыгина¹,
С.М. Расторгуев¹, О.И. Молканова², И.В. Митрофанова²**

¹НИИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия

²ФГБУН Главный ботанический сад им. Н.В. Цицина РАН (ГБС РАН), Москва, Россия

УДК: 575

Actinidia — род растений, самым известным представителем которого является киви (*Actinidia chinensis* var. *deliciosa*). Центрами происхождения многих других видов, включая *A. arguta*, являются Северо-Восточная Азия и Дальний Восток России. В отличие от *A. chinensis* var. *deliciosa* остальные виды этого рода малоизучены в генетическом плане. Сборки митохондриальных геномов растений в меньшей степени представлены в международных геномных базах данных; растительные митохондриальные ДНК (мтДНК) вариативнее пластидных (плДНК), содержат большое число повторов, непостоянны по количеству нуклеотидов, последовательности генов и соотношению между кодирующей и не кодирующей частью [1, 2].

В рамках работы по генотипированию сортов актинидии из коллекции ГБС РАН были также секвенированы дикие формы актинидий, включая *A. arguta*. ДНК *A. arguta* была выделена из молодых листьев модифицированным фенол-хлороформным методом экстракции с помощью СТАВ-буфера [3] и была использована для приготовления библиотек для секвенирования. Длинные чтения были получены на секвенаторе GridION, короткие чтения получены на секвенаторе MGI; с помощью длинных чтений были собраны кольцевые геномные контиги с использованием ассемблера Canu и дополнены короткими чтениями. Все кольцевые контиги были проанализированы с помощью программы BLAST.

В результате сборки и аннотации митохондриального генома была получена последовательность одной кольцевой молекулы мтДНК размером 700 т.п.н.; в последовательности присутствуют все гены, характерные для порядка Ericales. Полученные результаты являются первым шагом к характеристике диких форм актинидии российских питомников.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-16-00074).

1. Wynn E.L., Christensen A.C. Repeats of Unusual Size in Plant Mitochondrial Genomes: Identification, Incidence and Evolution // G3 Genes|Genomes|Genetics. 2019. V. 9. No. 2. P. 549–559.
2. Knoop, V. The mitochondrial DNA of land plants: peculiarities in phylogenetic perspective // Current Genetics. 2004. V. 46. P. 123–139.
3. Lo Piccolo S. et al. A simple and rapid DNA extraction method from leaves of grapevine suitable for polymerase chain reaction analysis // African Journal of Biotechnology. Vol. 11. No. 45. P. 10305–10309.

Оптимизация протокола поведенческого теста на грызунах fear conditioning с применением минископа

Е.Д. Гришина¹, Е.И. Герасимов¹, Е.И. Пчицкая¹, И.Б. Безпрозванный^{1,2}

¹Лаборатория Молекулярной Нейродегенерации, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

²Кафедра физиологии, Юго-Западный Медицинский Центр Университета Штата Техас, Даллас, США

УДК: 577.25, 57.084.1

Эксперименты *in vivo* формируют широкую область научной парадигмы и имеют высокий потенциал для изучения нейрофизиологии организмов. Визуализация нейронной активности животных в свободном движении и при выполнении поведенческих тестов представляет собой актуальную задачу в исследовании нейродегенеративных заболеваний, таких как болезнь Альцгеймера, болезнь Хантингтона и др. Решение этой задачи требует современных подходов. Минископ (Miniscope) является одним из оригинальных инструментов флуоресцентной микроскопии [1]. Его применение дает возможность наблюдать активность отдельных нейронов в разных структурах головного мозга, не ограничивая движения животного, что является важным условием для проведения поведенческих экспериментов. Однако, несмотря на очевидную эффективность комбинации этих методов, необходимо разрабатывать специфичные протоколы, которые учитывали бы все факторы, влияющие на организм и поведение животного.

В результате анализа методик классических поведенческих экспериментов для исследования был выбран Fear conditioning test как наиболее удобный тест для проведения параллельного кальциевого имаджинга с помощью Miniscope [2]. Fear conditioning test позволяет произвести оценку памяти и способности к ассоциативному обучению животных. Нарушение этих когнитивных функций является главным симптомом нейродегенеративных заболеваний.

При соединении двух методов – fear conditioning и Miniscope, основными проблемами являются механические манипуляции для фиксирования прибора на голове мыши и длительное пребывание исследуемого животного в такой конфигурации. Оба процесса сопряжены с сильным стрессом и утомлением, что может привести к искаженным, неверным результатам исследований. В результате был адаптирован и оптимизирован протокол, позволяющий снизить стрессовые факторы при проведении исследования. За 5 дней до начала поведенческого теста мышей приучаются к процедуре прикрепления миниатюрного микроскопа, что уменьшает стресс, обусловленный контактом с человеком (handling stress). В течение всего периода аккомодации после установки Miniscope животные помещаются на ограниченную площадку, где они могут свободно передвигаться, что позволяет мышам привыкнуть к весу прибора. Кроме того, было важно учесть влияние нейрохирургических операций на когнитивные способности, оцениваемые в эксперименте, а также проанализировать обучаемость мышей после инвазивных вмешательств. Для этого было изменено количество дней на разных этапах поведенческого теста – этапе аккомодации к месту проведения исследования и этапе контекстного тестирования. Таким образом, протокол был расширен одним дополнительным днем привыкания к обстановке внутри экспериментальной установки и одним днем тестирования консолидации памяти и обучаемости.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №22-15-00049 (Безпрозванный И. Б.).

1. Stamatakis A.M. et al. Miniature microscopes for manipulating and recording in vivo brain activity. *Microscopy (Oxf)*. 2021 Oct 5;70(5). P. 399-414.
2. Wu X. et al. Modified Miniscope System for Simultaneous Electrophysiology and Calcium Imaging in vivo. *Frontiers in Integrative Neuroscience*. 2021. V. 15.

Метагеномный анализ микробных сообществ, полученных из глубоководной части и шельфа черного моря

А.Е. Комиссаров¹, В.Г. Королев¹, С.В. Саранцева¹

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

УДК: 574.589, 579.262

Черное море является одним из самых крупных водоемов с низкой соленостью воды в мире. Оно имеет положительный водный баланс, т.е. получает больше пресной воды, чем теряет при испарении, и, следовательно, содержит меньше соли, чем, например, Средиземное море. По той же причине средний уровень воды в Черном море выше, чем в Мраморном море. Это приводит к формированию верхнего течения из Черного моря через пролив Босфор: менее соленого, богатого кислородом, а также обладающего температурой, приближенной к температуре воздуха. Глубинное течение менее быстрое и направлено в противоположную сторону. Оно находится на глубине ниже 150–200 м, имеет относительно постоянную температуру, является более соленым и плотным по составу воды [1]. К тому же глубинное течение является анаэробной средой.

Все эти свойства делают Черное море уникальной морской средой. Его глубина (в среднем 1253 м при максимальной 2212 м) делает эту систему намного более стабильной, чем в других соленых внутренних водоемах [2]. Несмотря на хорошо известные гидрологические и физико-химические особенности, эта огромная водная масса остается плохо изученной на уровне микробной геномики.

Таким образом, в данной работе проанализированы две группы микробных сообществ, полученных из различных слоев Черного моря. Первая группа образцов была взята с отметки 49 м ниже уровня моря, вторая группа образцов с отметки 2030 м. Проводился анализ последовательности 16s РНК метагеномных образцов, полученных с помощью секвенирования методом MinION Oxford Nanopore.

В ходе работы было выявлено 111 видов микроорганизмов. С поправкой контрольного образца, в образце с глубины 49 м было выявлено 28 видов микроорганизмов, которые не встречались в контрольном и образце с глубины 2030 м, а в образце с глубины 2030 м было выявлено 18 видов бактерий уникальных для этой выборки. Также было обнаружено 29 микроорганизмов, которые присутствуют в образце с глубины 49 м и с глубины 2030 м.

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

1. Orhon D. et al. Pollutant dynamics between the Black Sea and the Marmara Sea: Basis for wastewater management strategy //Marine Pollution Bulletin. 2021. V. 168. P. 112388.
2. Cabello-Yeves P. J. et al. The microbiome of the Black Sea water column analyzed by shotgun and genome centric metagenomics //Environmental microbiome. 2021. V. 16. No. 1. P. 1-15.

Фактор ремоделирования хроматина CHD1 в процессе дозовой компенсации у самцов *Drosophila melanogaster*

Я.А. Кучинская, А.А. Сидорова, А.А. Рыбалкина, А.Ю. Конев

НИИ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

УДК: 577.218

Процесс дозовой компенсации (ДК) у самцов *Drosophila melanogaster* был использован нами в качестве модели для изучения функций консервативного хроматин-ремоделирующего фактора CHD1 (*chromodomain-helicase-DNA-binding protein 1*). Данный процесс направлен на увеличение экспрессии X-хромосомных генов у самцов дрозофилы примерно в два раза. Центральное место в этом процессе занимает комплекс дозовой компенсации (MSL: *male-specific lethal*), включающий в себя белки MSL1-MSL3, ацетилтрансферазу MOF, РНК геликазу MLE и две длинные некодирующие РНК (roX1 и roX2). [1]. Предпосылкой для исследования послужил факт сильной деформации X-хромосомы у самцов дрозофилы на фоне мутации гена *Chd1*, а также связывание белка CHD1 материнского происхождения у таких особей исключительно с X-хромосомой [2].

Нами показано, что фактор CHD1 специфически привлекается к X-хромосоме самцов и такое привлечение связано с процессом ДК. Сайты в X-хромосоме самцов являются наиболее предпочтительными для связывания фактора CHD1: при малом количестве белка (у нуль-мутантных по гену *Chd1* самцов) весь белок материнского происхождения связывается исключительно с половой хромосомой, у самцов дикого типа наблюдается повышенное привлечение к X-хромосоме, но при избыточном количестве белка CHD1 в результате сверхэкспрессии различия в локализации этого фактора в X-хромосоме самцов и самок исчезают. Кроме того, сверхэкспрессия белка CHD1 (как нативной, так и каталитически не активной формы) приводит к появлению эктопических сайтов локализации комплекса ДК в аутосомах. Но остаётся не ясным какие именно факторы участвуют в привлечении CHD1: так у нуль-мутантных самцов не отличалось от дикого типа и распределение таких белка PAF1 (у дрожжей комплекс PAF участвует в рекрутировании фактора CHD1), также и РНК-геликаза Rm62 не вовлечена в привлечение, не смотря на схожие нарушения регрессии пуфов при мутациях, с теми, которые наблюдаются при сверхэкспрессии белка CHD1.

Нами получены данные о специфическом вовлечении *Chd1* в регуляцию экспрессии длинных некодирующих РНК roX1 и roX2 в ходе развития. Наибольшие различия в уровне экспрессии между диким типом и нуль-мутантом по гену *Chd1* обнаружено в головах 4-х и 10-дневных имаго. Уровень экспрессии днРНК roX1 увеличен в 3,9 и 3,4 раза соответственно, а для roX2 показано достоверное снижение экспрессии в головах с возрастом по сравнению с контрольными особями.

Для изучения влияния мутаций *Chd1* на процесс дозовой компенсации нами проводилось сравнение профилей экспрессии X-хромосомных и аутосомных генов у личинок обоих полов дикого типа и *Chd1* нуль-мутантов полученных методом РНК секвенирования. Графики плотности распределения значений log2FoldChange для дифференциальной экспрессии генов X-хромосом и аутосом групп сравнения показали для мутантных по гену *Chd1* самцов небольшой, но достоверный сдвиг в распределении плотности log2FoldChange в сторону увеличения экспрессии для X-хромосомных генов по сравнению с аутосомными. При этом для самок различий на фоне мутации *Chd1* не обнаружено. Полученные результаты свидетельствуют о вовлечении CHD1 в регуляцию структуры хроматина и экспрессии генов связанных с ДК у дрозофилы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-04-00864

1. Conrad, T. et al. Dosage compensation in *Drosophila melanogaster*: epigenetic fine-tuning of chromosome-wide transcription // *Nat Rev Genet.* 2012. V. 13. No. 2. P. 123-134.
2. Tiutiunnik A. et al. The role of the chromatin remodeling factor CHD1 in the global organization of *Drosophila* chromosomes. // *Biopolymers & Cell.* 2019. V. 35. N. 3. P. 174–175.

Производное пиперазина способствует полимеризации актина *in vitro*

Д.М. Мелентьева¹, Н. И. Зернов¹, В. С. Камарян², А. Т. Макичян², Л. С. Унанян^{1,2},
Е. А. Попугаева¹

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

²Российско-Армянский университет, Ереван, Армения

УДК: 577.25

Болезнь Альцгеймера — это заболевание, характеризующееся сбоями в кальциевом сигналинге, что приводит к деструкции актинового цитоскелета дэндритов нейронов и структурной деформации грибовидных шипиков. Ранее были проведены исследования, доказывающие, что соединение 51164, из группы производных пиперазинов, способно восстанавливать синаптическую пластичность в нейронах гиппокампа [1]. Нейропротекторный эффект 51164 заключается с одной стороны в нормализации кальциевого входа в нейроны через активацию TRPC6 каналов, с другой - в его способности непосредственно связываться с фибриллярным актином, предотвращая его деполимеризацию. Взаимодействие 51164 с F-актином показано *in silico* и *in vitro* [2]. Однако данная структура не прошла доклинических исследований. Тогда среди производных пиперазинов были отобраны несколько соединений, соответствующих критериям «Правила пяти» Липинского и отвечающих заданным требованиям структурной и функциональной схожести с 51164. По результатам *in vitro* исследования визуализации цитозольного кальция было выбрано соединение Z12-30 — лидер по способности активировать рецептор-управляемый путь открытия TRPC6. Было выдвинуто предположение о наличии у данного соединения актино-протекторных свойств по аналогии с 51164.

Способность Z12-30 поддерживать актин в полимерной форме проверялась в рамках настоящей работы на первичной культуре фибробластов мышей линии FVB. Одна группа клеток в течение 15 минут подвергалась действию токсина цитохалазина D [12,5 мг/л], деполимеризующего актиновые фибриллы, что фиксировалось с использованием конфокального микроскопа. Другая группа клеток предварительно испытывала на себе влияние Z12-30 в концентрации 10 мкМ, что приводило к сохранению значительной части актина в форме тяжелой F-актина.

Таким образом, определена *in vitro* способность Z12-30 влиять на актиновый скелет фибробластов, поддерживая его структуру. Также особенности строения Z12-30 как производного пиперазина делают его перспективным в дальнейшем исследовании нейропротекторных и фармакокинетических свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания по теме: «Реализации комплекса мер по повышению эффективности деятельности Российско-Армянского (Славянского) университета».

1. Popugaeva, E.; Chernyuk, D.; Zhang, H.; Postnikova, T.Y.; Pats, K.; Fedorova, E.; Poroikov, V.; Zaitsev, A. V.; Bezprozvanny, I. Derivatives of Piperazines as Potential Therapeutic Agents for Alzheimer's Disease // *Mol. Pharmacol.* 2019. 95, 337–348, doi:10.1124/mol.118.114348.

2. Н. И. Зернов, В. С. Камарян, А. Т. Макичян, Л. С. Унанян, Е. А. Попугаева. Исследование влияния N-(2-Хлорфенил)-2-(4-Фенилпиперазин-1-Ил) ацетамида на полимеризацию актина // *OpenScience.* 2021. 82.

Применение ИК спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения для анализа вторичной структуры белков сыворотки крови

Э.С. Михайлец¹, Д.А. Чернышев¹, Л.В. Плотникова¹, А.М. Поляничко¹

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

УДК: 577.322.52, 535.343.32

Инфракрасная спектроскопия является полезным инструментом для исследования вторичной структуры белков. Для спектров ИК поглощения белков характерно наличие полос вблизи 1650, 1540 и 1240 см⁻¹, которые носят название Амид I, Амид II и Амид III соответственно. Каждая из этих полос является суперпозицией колебаний пептидных связей, находящихся в составе участков полипептидной цепи в различных конформациях. Наиболее достоверные данные о вторичной структуре белка даёт анализ структуры полосы Амид I, отвечающей колебаниям С=О связи. Это связано прежде всего с тем, что она имеет довольно высокую интенсивность, а также меньше подвержена влиянию колебаний боковых цепей [1].

В работе при помощи ИК спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) были исследованы образцы сыворотки крови, принадлежащие двум различным группам: здоровые доноры и больные множественной миеломой (ММ). Спектры поглощения были получены при помощи ИК-спектрометра Nicolet 8700 (Thermo Scientific, США), оснащённого приставкой НПВО iTR. Регистрация спектров проводилась с разрешением 4 см⁻¹ с усреднением по 256 накоплениям.

Из полученных спектров выделяли полосу Амид I, которую далее раскладывали на составляющие, положение которых определялось при помощи анализа второй производной и Фурье-самодеконволюции спектров [2–4]. В результате разложения удалось выделить по 6–7 полос, составляющих полосу Амид I. В полученных разложениях для двух исследованных групп образцов наблюдаются различия в количестве и положении полос. Известно, что ММ характеризуется гиперпродукцией в крови определенного типа иммуноглобулина или его фрагментов, что может приводить к существенным изменениям в белковом составе крови и, следовательно, к диспропорции в содержании различных вторичных структур [5].

Работа была выполнена с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ («Оптические и лазерные методы исследования вещества», «Центр диагностики функциональных материалов для медицины фармакологии и наноэлектроники», «Криогенный отдел»).

Авторы выражают благодарность сотрудникам гематологической клиники Российского научно-исследовательского института гематологии и трансфузиологии (г. Санкт-Петербург, Россия) за любезно предоставленные образцы сыворотки крови.

1. Barth A. et al. What vibrations tell about proteins // Quarterly Rev. Biophys. 2002. V. 35. P. 369–430.
2. Tooke. P. B. Fourier self-deconvolution in IR spectroscopy // Trends in analytical chemistry. 1988. V. 7, No. 4. P. 130–136.
3. Fevzioglu M. et al. Quantitative approach to study secondary structure of proteins by FT-IR spectroscopy, using a model wheat gluten system // International Journal of Biological Macromolecules. 2020. V. 164. P. 2753–2760.
4. Susi H. et al. Protein structure by Fourier transform infrared spectroscopy: second derivative spectra // Biochem. Biophys. Res. Commun. 1983. V. 115. P. 391–7.
5. Kyle R.A. et al. Criteria for diagnosis, staging, risk stratification and response assessment of multiple myeloma // Leukemia. 2009. V. 23. No 1. P. 3–9.

**Репозиционирование методом виртуального скрининга одобренных к
применению лекарственных препаратов
потенциальных фармакологических шаперонов глюкоцереброзидазы человека**

М.А. Николаев^{1,2}, С.Н. Пчелина^{1,2}, А.К. Емельянов^{1,2}, Г.Н. Рычков¹

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

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

УДК 577.29, 575.1

Наиболее распространенным фактором повышенного риска развития болезни Паркинсона (БП) являются мутации в гене глюкоцереброзидазы (GBA). В гомозиготном, а также в компаундном гетерозиготном состоянии, мутации в данном гене приводят к развитию болезни Гоше (БГ). Все больше обсуждается использование фармакологических шаперонов (ФС) ГЦ для терапии как GBA-БП, так и БГ.

Целью проводимого исследования являлся виртуальный скрининг широкого круга известных лекарственных препаратов потенциальных аллостерических шаперонов наиболее распространенной мутантной формы N370S ГЦ, которые не являются конкурентными ингибиторами фермента.

С использованием метода молекулярного докинга на атомарной модели ГЦ, построенной нами ранее [1] мы провели виртуальный скрининг 4178 одобренных к применению в клинической практике химических соединений. По результатам скрининга отобрали 52 соединения, обладающие наименьшей величиной расчётной оценочной функции, характеризующей сродство к белку. Данные препараты принадлежали различным фармакологическим группам (антидепрессанты, гастропротекторы, витамины, антигистаминные препараты, гипополипидемические средства, нестероидные противовоспалительные средства, стимуляторы дыхания, антиоксиданты, миорелаксанты центрального действия), из которых для дальнейшего исследования выбрали 12, прием которых в клинической практике возможен длительное время. Стабильность комплексов ГЦ с отобранными химическими соединениями проверяли методом молекулярной динамики с явным учётом водного окружения, используя пакет программ AMBER18 [2]. На данный момент из восьми проверенных комплексов свободной энергией связывания ниже 35 ккал/моль, рассчитанной методом MMGBSA, обладает пять химических соединений, производных от s-триазин-2,4-диамина, дулоксетина глюкуронида, бензолкарботиоата, бензоксепин-2-ил уксусной и хинолин-пропановой кислот.

Таким образом, в результате проведенного исследования из расширенной базы одобренных к применению лекарственных препаратов были выбраны потенциальные фармакологические шапероны ГЦ, способность которых повышать ее ферментативную активность, а также снижать уровень субстрата HexSph требует дальнейшего изучения.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №22-25-00721. Вычисления проводились с использованием ресурсов суперкомпьютерного центра СПбПУ Петра Великого.

1. Kopytova AE et al. Ambroxol increases glucocerebrosidase (GCase) activity and restores GCase translocation in primary patient-derived macrophages in Gaucher disease and Parkinsonism. *Parkinsonism Relat Disord.*84 (2021)112-121.
2. D.A. Case et al. The Amber biomolecular simulation programs. *J. Computat. Chem.* 26 (2005) 1668-1688.

Отдаленные эффекты в иммунокомпетентных органах при моделировании радиохимиотерапии на половозрелых крысах

Е.В. Пронских^{1,2}, И.А. Колесникова¹, Ю.С. Северюхин^{1,2}, Д.М. Утина¹, К.Н. Голикова¹,
М. Лалковичова¹

¹Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

²Государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московской области «Университет «Дубна», г. Дубна, Россия

УДК: 57.084.1, 576.08

Данная работа является частью более крупного исследования ЛРБ ОИЯИ по моделированию радиохимиотерапии на половозрелых крысах. Использование арабинозин цитозида (АраЦ) как перспективного препарата при комбинации его с протонным облучением требует изучения множества его радиобиологических эффектов. Влияние ингибиторов синтеза ДНК (арабинозин цитозида) на различные клетки при действии излучений разного качества описаны в статьях [1,2]. Целью работы являлось исследование влияния комбинированного применения протонов в дозе 3 Гр и АраЦ на физиологические показатели иммунокомпетентных органов на 90-е сутки.

Самцы крыс линии Sprague Dawley были рандомизированы по массе на 4 группы: контроль, контроль+АраЦ, облучение и облучение+АраЦ и облучены тотально протонами в дозе 3 Гр. Исследуемый препарат вводили в хвостовую вену за 1-1,5 часа до облучения.

Отбор всех образцов производился на 90-е сутки сразу после декапитации и включал в себя исследование массы селезенки и тимуса, а также подсчет количества лейкоцитов и оценку лейкоцитарной формулы. Статистическая обработка производилась в программах PAST и «OriginPro 2018».

При сравнительном анализе количества лейкоцитов выявлено достоверное различие в группе АраЦ, однако средние значения во всех группах входят в референсный интервал для крыс данной линии этого возраста, а цитологическое исследование всех мазков крови не выявило ни отклонений от клинической нормы, ни изменения лейкоформулы. При сравнительном анализе массы тимуса отмечалось достоверное снижение в группе «Протоны+АраЦ», что является ожидаемым эффектом при тотальном облучении животного. В полученных данных не выявлено функционально значимых различий в побочных эффектах протонной терапии при модификации её арабинозин цитозидом, так как все достоверные изменения соотносятся либо с физиологической нормой крыс, либо ожидаемыми эффектами тотального облучения. Таким образом, результаты исследования на нормальных тканях свидетельствуют о том, что использование арабинозин цитозида в комбинации с протонным облучением не приводит к возникновению значимых отдаленных побочных эффектов, а, следовательно, может являться перспективным методом терапии. Необходимы дальнейшие исследования на опухолевых моделях.

Работа выполнена при поддержке при поддержке Гранта ОМУС 22-702-03

1. А.В. Борейко, В.Н. Чаусов, Е.А. Красавин, И. Равначка, С.И. Стукова. Влияние ингибиторов синтеза ДНК на индукцию и репарацию двунитевых разрывов ДНК в лимфоцитах человека при действии излучений с разной ЛПЭ // Письма в ЭЧАЯ. 2011. Т.8, №4 (167). С. 670-678.
2. Е.А. Красавин, А.В. Борейко, М.Г. Заднепрянец, Е.В. Ильина, Р.А. Кожина, Е.А. Кузьмина, Е.А. Куликова, Е.В. Смирнова, Г.Н. Тимошенко, С.И. Тиунчик, В.Н. Чаусов Влияние ингибиторов синтеза ДНК на биологическую эффективность пучка протонов в модифицированном пике Брэгга // Письма в ЭЧАЯ. 2019. Т.16, №2(221). С. 181-190.

Доставка экзогенного белка в клетки человека при помощи экстраклеточных везикул микроводорослей

Е.Д. Путевич^{1,4}, Л.А-А. Гараева^{1,2,4}, А.С. Спицына¹, Е.А. Толстыко²,
С.С. Емельянова^{1,3}, Е.В. Ястремский², Е.Ю. Комарова³, И.А. Сизова¹, Т.А. Штам^{1,2,3}

1. НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, Гатчина, Россия

2. НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

3. Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

4. ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», Санкт-Петербург, Россия

УДК: 57.085.23

Экстраклеточные везикулы (ЭВ) – наноразмерные частицы, окруженные липидным бислоем, переносящие белки и нуклеиновые кислоты. ЭВ представляют собой перспективные системы доставки лекарственных веществ, поскольку могут целенаправленно доставлять молекулы без преждевременной деградации [1]. Микроводоросли часто используются в производственных масштабах, как источники различных биоактивных веществ для пищевой и косметической промышленности. Поэтому представляют собой перспективные источники ЭВ [2].

В данной работе были исследованы ЭВ, выделенные из микроводорослей: *Chlamydomonadaceae* и *Chlorella*. Были оценены некоторые физические свойства ЭВ и их способность доставлять экзогенный белок к клеткам человека *in vitro*.

В ходе данного исследования ЭВ из культуральной среды были выделены методом последовательного центрифугирования. Были подобраны оптимальные условия, при которых микроводоросли продуцируют наибольшее количество ЭВ. Так, в культуральной среде было обнаружено больше ЭВ при воздействии света на микроводоросли, а также и при тепловом шоке.

Размеры ЭВ были оценены 3 методами: атомно-силовой микроскопией, анализом траектории наночастиц и динамическим рассеянием света. Размеры ЭВ распределены в диапазоне от 30 до 200 нм. Также при помощи криоэлектронной микроскопии была оценена морфология ЭВ. Так, ЭВ имеют преимущественно сферическую форму, однако, также встречаются ЭВ неправильной формы и имеющие несколько билипидных слоев. При помощи электрофоретического рассеяния света был оценен дзета-потенциал выделенных ЭВ. При помощи флуориметрии была произведена оценка влияния всех вышеперечисленных параметров на эффективность загрузки экзогенного белка в ЭВ.

ЭВ были нагружены флуоресцентно меченным белком HSP70-Alexa647 методом ультразвука, после чего были инкубированы с клетками GI-Tg в течение 4 часов. Анализ флуоресценции клеток при помощи проточной цитометрии позволил заключить, что ЭВ, выделенные из микроводорослей, успешно доставляют экзогенный белок к клеткам человека *in vitro*.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-74-20146).

1. Zhao L. et al. Extracellular Vesicles: A Novel Messenger of Unicellular Microalgae Communication? 2020.
2. Picciotto S. et al. Isolation of extracellular vesicles from microalgae: Towards the production of sustainable and natural nanocarriers of bioactive compounds // *Biomater. Sci.* 2021. Vol. 9, № 8. P. 2917–2930.

Сравнение специфичности действия ингибиторов рецептора CSF-1 и синтезированных гибридных соединений с хиназолиновой и гидроксамовой фармакофорными группами в отношении клеток микроглии

Д.А. Шапошникова, В.Г. Шуватова, В.Н. Осипов, Д.С. Хачатрян

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

УДК: 576.38

В основе многих нейродегенеративных заболеваний лежит развитие нейровоспаления и связанных с ним нарушений нейрогенеза и повреждения нейронов. В инициации и прогрессировании нейровоспаления ключевая роль принадлежит микроглии. Контроль степени активации микроглии в ЦНС имеет определяющее значение в регуляции уровня нейровоспаления и определяемых им когнитивных нарушений. Одним из актуальных направлений в поиске способов лечения нейродегенеративных заболеваний является поиск блокирования пролиферации клеток микроглии с помощью ингибиторов протеинкиназ, участвующих в передаче сигналов пролиферации и выживания от рецептора макрофагального колониестимулирующего фактора 1 типа (CSF-1R) [2]. Известно, что фармакологическое ингибирование CSF1R вызывает истощение микроглии и облегчает симптомов нейродегенеративных заболеваний [1]. Гистондеацетилазы (HDAC) также могут быть перспективными регуляторами активации микроглии ввиду их влияния на экспрессию ряда генов, контролирующей клеточную пролиферацию.

Целью работы явилась оценка чувствительности клеток микроглии мыши линии SIM-A9 к четырем синтезированным ингибиторам HDAC из класса хиназолинов (GAW-037, GAW-039, GAW-045 и OVFV-378) в сравнении с известными ингибиторами CSF-1R – пексидартинибом (PLX3397) и GW2580, и ингибитором широкого спектра рецепторных и внутриклеточных тирозинкиназ дазатинибом и сопоставление с чувствительностью опухолевых клеток к этим препаратам.

Клетки высевали в 96-луночные планшеты за 24 ч до эксперимента. Вещества добавляли в различных концентрациях и культивировали в стандартных условиях в течение 72 ч. Жизнеспособность клеток определяли с помощью МТТ-теста по методу Mosmann. Выживаемость клеток оценивали в процентах от соответствующего контроля и по кривым выживаемости определяли значения IC₅₀.

Показано, что клетки микроглии наиболее чувствительны к дазатинибу (IC₅₀=0,39±0,03 мкМ); для пексидартиниба и GW2580 получены значения IC₅₀: 38,7±1 и 77,5±5,3 мкМ соответственно. Ингибиторы HDAC GAW-037, GAW-039 и GAW-045 также ингибировали пролиферацию клеток микроглии SIM-A9 – IC₅₀ для них составила 9,7; 21,1 и 8,4 мкМ соответственно. Наименее токсичным был препарат OVFV-378, для которого IC₅₀ составила 129,1±0,5 мкМ. Все исследованные препараты ингибировали пролиферацию опухолевых клеток человека и мыши в близком диапазоне концентраций.

Таким образом, исследованные ингибиторы HDAC блокируют пролиферацию клеток микроглии в том же диапазоне концентраций, что и ингибиторы рецептора CSF-1R. Полученные результаты позволяют рассматривать ингибиторы HDAC в качестве потенциальных регуляторов активности микроглии и свидетельствуют о целесообразности исследования возможности их использования для коррекции нейровоспаления, вызванного чрезмерной активацией микроглии.

1. Elmore M.R. et al. Colony-stimulating factor 1 receptor signaling is necessary for microglia viability, unmasking a microglia progenitor cell in the adult brain. *Neuron*. 2014 Apr 16;82(2):380-97.
2. Pixley F.J., Stanley E.R. CSF-1 regulation of the wandering macrophage: complexity in action. *Trends Cell Biol*. 2004 Nov;14(11):628-38.

Зависимость внутримолекулярной динамики пиллар[5]арена от кислотности среды

Л.В. Шарипова^{1,2}, Б.И. Хайрутдинов^{1,2}, Ю.Ф. Зуев²

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Казанский институт биохимии и биофизики ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

УДК: 543.429.23

Современная супрамолекулярная химия развивает принципы конструирования макроциклических соединений, способных к распознаванию биологически важных субстратов. Основой подобных супрамолекулярных систем являются макроциклические соединения, способные к образованию комплексов включения (комплексов «гость-хозяин») – пиллар(п)арен [1]. Преимущества пиллар(п)аренов над другими макроциклическими соединениями являются: синтетическая доступность, трубчатая пространственная структура, формирование электронодонорской полости, планарная хиральность, хорошая растворимость в воде [2]. Данные свойства представляют собой важными предпосылками для их практического применения в любых системах доставки лекарств.

Цель представленной работы - изучение внутримолекулярной подвижности декааммониевой соли 4,8,14,18,23,26,28,31,32,35-дека (карбоксиметокси) - пиллар[5]арена.

В данной работе методами ЯМР спектроскопии высокого разрешения выполнено исследование влияния внешних условий среды на динамические свойства пиллар[5]арена. Для подтверждения подвижности протонов гидрохинонового фрагмента пиллар[5]арена использована импульсная последовательная КПМГ (Карра-Парселла-Мейбума-Гилла). Из анализа спектров КПМГ получены константы скорости химического обмена данных протонов при различных значениях рН раствора. Термодинамические параметры подвижности протонов гидрохинонового фрагмента пиллар[5]арена определены из температурных зависимостей константы скорости химического обмена.

1. Ogoshi T. et al. *para*-Bridged Symmetrical Pillar[5]arenes: Their Lewis Acid Catalyzed Synthesis and Host–Guest Property // *J. Am. Chem. Soc.* 2008. V. 130. No. 15. P. 5022–5023.
2. Cao D., Meier H. Pillar[*n*]arenes—a Novel, Highly Promising Class of Macrocyclic Host Molecules // *Asian J. Org. Chem.* 2014. V. 3. No. 3. P. 244.

Генетические аспекты развития нервно-мышечных заболеваний

Е.Э. Слепнёва¹, А.Е. Комиссаров¹, А.Д. Слободина¹, С.В. Саранцева¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия

УДК: 575

Нервно-мышечные заболевания (НМЗ) – условно выделяемая группа врожденных патологий, характеризующихся изменением нормальной структуры и функционирования мышц, а также поражением периферических нервов и мотонейронов спинного мозга. У пациентов с подобными заболеваниями часто наблюдаются серьезные нарушения функционирования опорно-двигательного аппарата, а также в ряде случаев врожденные контрактуры суставов. При описании клинической картины заболеваний, сопровождающихся наличием врожденных множественных контрактур, как правило используют обобщающий термин «артрогрипоз» [1]. Значительный интерес исследователей вызывают наследственные факторы, приводящие к нарушениям в развитии и функционировании центральной нервной системы, поскольку известно что существует некоторое пересечение клинико-генетических спектров определенных НМЗ и нейродегенеративных заболеваний [2]. Таким образом для понимания причин приводящих к нарушениям функционирования опорно-двигательного аппарата у пациентов с НМЗ необходимо изучение достаточно широкой области разнообразных наследственных факторов. В настоящий момент продолжается поиск молекулярных биомаркеров патогенеза заболеваний с артрогрипозом, поскольку генетические аспекты возникновения НМЗ полностью не изучены [1].

В ходе данного исследования была дополнена и описана коллекция образцов материала (образцы ДНК, биопсийный материал), полученного от пациентов с НМЗ и их ближайших родственников.

Из литературных данных известно, что мутации в гене эмбрионального миозина *MYH3* и в гене кодирующем быструю изоформу тропонина I (*TnI*) являются одной из наиболее распространенных причин развития ДА [3]. Исходя из этого, было проведено секвенирование по Сенгеру участков гена *MYH3* в ходе которого была обнаружена миссенс-мутация *c.2015 G>A* (p.Arg672His) ассоциированная с развитием синдрома Фримана-Шелдона и редкая, не описанная в литературе миссенс-мутация *c.4358T>C* (p.Val1453Ala). Также было проведено секвенирование по Сенгеру участков гена *TNNI2* в ходе которого была обнаружена нонсенс-мутация *c.466C>T* (p.Arg156Ter), приводящая к потере 26 С-концевых аминокислот в области, необходимой для полной ингибирующей активности *TnI*. Ожидается что наш анализ станет промежуточным звеном в области исследований направленных на оптимизацию молекулярно-генетической диагностики, а также усовершенствование классификации НМЗ.

Работа выполнена при поддержке ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Развитие молекулярных и клеточных технологий».

1. Габбасова Е.Л., Комиссаров А.Е., Агранович О.Е., и др. Наследственная сенсомоторная полинейропатия // Ортопедия, травматология и восстановительная хирургия детского возраста. 2020. Т. 8. Вып. 3. С. 333–342. <https://doi.org/10.17816/PTORS21182>
2. Martin P.B., Hicks A.N., Holbrook S.E., et al. Overlapping spectrums: the clinicogenetic commonalities between Charcot-Marie-Tooth and other neurodegenerative diseases. // Brain Res. 2020. V.1727. P. 1-35. <https://doi:10.1016/j.brainres.2019.146532>
3. Beck A.E., McMilin M.J., Gildersleeve H.S., et al. Spectrum of mutations that cause distal arthrogyriposis types 1 and 2B. // Am J Med Genet A. 2013. V.161. P. 550-555. doi:10.1002/ajmg.a.35809.

Хитозаназная активность природного изолята *Bacillus* sp. 67.1

*Е.В.Соболева*¹, *В.Р.Сергеев*^{1,2}, *Ю.В.Киль*¹, *Г.Н.Рычков*^{1,2}, *М.А.Суржик*¹

1- Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

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

УДК 577.151

Хитозан – это нерастворимый в воде линейный аминополисахарид, состоящий преимущественно из остатков D-глюкозамина, соединенных β -1,4-гликозидными связями и N-ацетил-D-глюкозамина, содержание которого может достигать 50%. Водорастворимый олигомерный хитозан со степенью полимеризации более 5, образующийся при частичной деградации высокомолекулярного полисахарида, обладает множественной биологической активностью и является перспективным для использования в области медицины, косметологии и сельского хозяйства [1,2]. Физико-химические свойства олигомерного хитозана во многом определяются методом его получения. Одним из наиболее перспективных способов получения этих соединений является ферментативная деполимеризация хитозана, которая может быть осуществлена с помощью различных групп гидролаз, в том числе коммерческих препаратов неспецифических ферментов – липаз, папаина, пепсина, целлюлаз, лизоцима и др. [3]. Высокоспецифичные хитозаназы (КФ 3.2.1.132) способны осуществлять глубокую деградацию исходного полимера при удельной активности, превышающей активность неспецифических ферментов в десятки и сотни раз.

Целью данной работы являлся поиск и изучение новых ферментов, способных деполимеризовывать хитозан. Первичный поиск микроорганизмов с высокой хитозаназной активностью проводили среди природных изолятов, выделенных из образцов почв различных регионов Российской Федерации. В результате скрининга был отобран изолят 67.1, способный секретировать фермент с высокой хитозаназной активностью в культуральную среду. Максимальный уровень гидролиза хитозана достигался при оптимальной температуре 30°C через 48 часов, при этом отсутствовала необходимость в субстрате индукторе – хитине или хитозане. По результатам проверки активности 67.1 в диапазоне температур от 40°C до 75°C установили, что наибольшая активность достигается при 60°C. При определении остаточной активности после инкубации 67.1 в течение 10 минут без субстрата при температурах от 20°C до 70°C оказалось, что фермент стабилен только до 40°C. При 45°C его остаточная активность значительно падала, а после инкубации при 50°C фермент полностью терял активность. Определили рН оптимум активности. Показали, что после 24-х часов инкубации ферментного препарата в буферных растворах с различными значениями рН наибольшая стабильность регистрируется при значениях рН 7,0. Филогенетический анализ по последовательности фрагментов гена 16S РНК позволил отнести изолят 67.1 к роду *Bacillus*.

Далее планируется более детальное изучение характеристик чистых ферментных препаратов, определение специфичности фермента, а также исследование продуктов его реакции.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Новые технологии и прикладные исследования» (регистрационный номер № 121060200111-5).

1. Aam B.V., Heggset E.B., Norberg A.L., Sorlie M., Varum K.M., Eijsink V.G.H. // *Mar. Drugs*. 2010. V. 8. № 5. P. 1482–1517.
2. Kerch G. // *Mar. Drugs*. 2015. V. 13. № 4. P. 2158–2182.
3. Г.Э. Актуганов, А.И. Мелентьев Особенности деполимеризации хитозана хитиназами, хитозаназами и неспецифическими ферментами при получении биоактивных хитоолигосахаридов // *Прикладная биохимия и микробиология*, 2017, том 53, № 6, с. 551–567.

Изучение роли фактора сборки и ремоделирования хроматина *Chd1* в регуляции транскрипции тканеспецифичных генов в ходе развития дрозофилы

А.В. Торошина¹, А.Ю. Конев¹

¹ФГБУ Петербургский институт ядерной физики НИЦ “Курчатовский институт”,
Гатчина, Россия

УДК: 577.2

CHD1 (*Chromodomain-Helicase DNA-binding 1*) – это консервативный АТФ-зависимый хроматин-ремоделирующий фактор. Хроматин-ремоделирующие факторы необходимы для преобразований хроматина в процессах реализации генетической информации. Впервые было показано участие белка CHD1 дрозофилы не только в ремоделировании хроматина, но и в сборке хроматина *in vivo* [1].

Геном человека содержит два гомолога CHD (CHD1 и CHD2), считающихся онкогенами. Как гомозиготные делеции гена *Chd1*, так и сверхпродукция белка CHD1 принимают непосредственное участие в процессах образования онкологических опухолей простаты [2], что делает этот фактор возможной терапевтической мишенью. Фактор CHD2 также вовлечен в процессы развития эпилепсии.

В геноме дрозофилы был найден всего один ген CHD1. Отсутствие или дисфункция белка CHD1 провоцирует нарушение сборки хроматина в мужском пронуклеусе и нежизнеспособность эмбрионов [1]. CHD1 принимает участие в регуляции транскрипции, в политенных хромосомах он колокализуется с элонгирующей формой РНК-полимеразы II, необходим при работе РНК-полимеразы I [3].

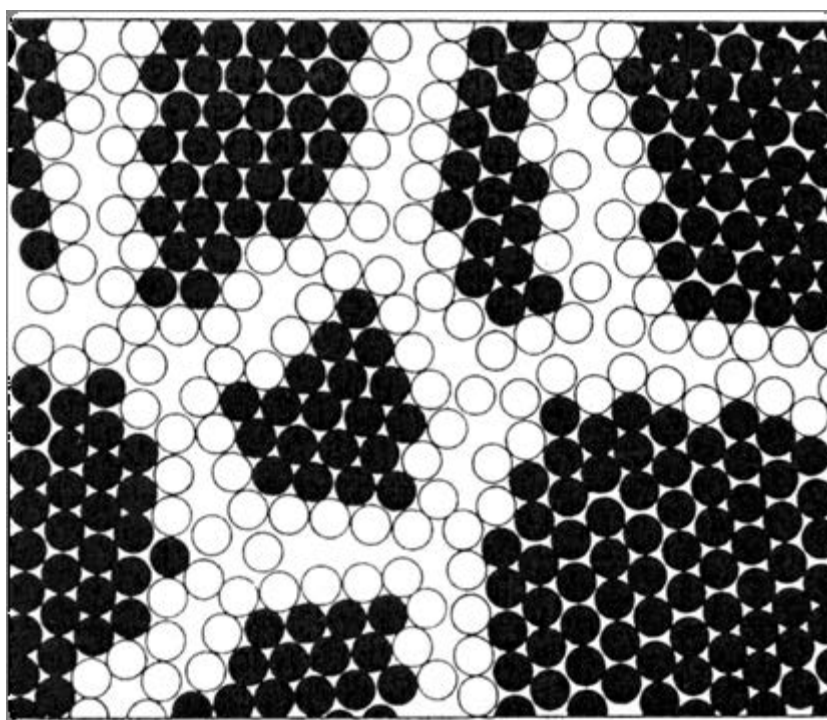
Сверхпродукция в клетках дрозофилы хроматин-ремоделирующих белков дикого типа и форм белков с нарушенной АТФ-азной активностью часто используется для исследования их функций и механизма действия. Ранее нами показано, что сверхэкспрессия в клетках слюнных желез личинок дрозофилы как нативной, так и каталитически неактивной форм белка CHD1 приводит к деформации и деконденсации определенных участков политенных хромосом, с которыми связывается белок CHD1 и РНК-полимераза II. Изменения морфологии хромосом при сверхэкспрессии отличаются от эффекта нуль-мутаций *Chd1*, где укорочение хромосомы и нарушение дисковой структуры наблюдается только для X-хромосомы самцов.

В данной работе с помощью метода RT-qPCR мы проанализировали влияние сверхпродукций исследуемых форм белка CHD1, а также нуль-мутаций гена *Chd1* на экспрессию ряда генов, специфических для слюнных желез, резко изменяющих уровень транскрипции в ходе развития. Они расположены в участках хромосом, аномально деконденсированных при сверхпродукции исследуемых форм CHD1. Мы показали, что особи со сверхпродукцией как белка CHD1 дикого типа, так и его каталитически неактивной формы проявляют достоверные отклонения от особей дикого типа в уровне экспрессии исследованных генов и динамике ее изменений в ходе развития. Для исследованных генов наблюдается сходный характер изменений транскрипции при сверхпродукции обеих форм белка, который не совпадает с эффектами нуль-мутаций *Chd1*. Таким образом, влияние сверхэкспрессии трансгенов *Chd1* и на структуру хромосом, и на транскрипцию исследованных генов связано с высокой концентрацией белка в клетке, а не его каталитической активностью.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-04-00864.

1. Konev A. Y., M. Tribus S. Y., Park V., Podhraski C. Y. et al. CHD1 motor protein is required for deposition of histone variant H3.3 into chromatin *in vivo*. *Science*. 2007. V. 317(5841). P. 1087-1090.
2. Rodrigues L. U., Rider L., Nieto C., Romero L. et al. Coordinate loss of MAP3K7 and CHD1 promotes aggressive prostate cancer. *Cancer Res*. 2015. V. 15, 75(6). P. 1021-34.
3. McDaniel I. E., Lee J. M., Berger M. S., Hanagami C. K., Armstrong J. A. Investigation of CHD1 function in transcription and development of *Drosophila melanogaster*. *Genetics*. 2008. V. 178(1). P. 583-587.

Материаловедение и новые материалы



Малослойный графен синтезированный в условиях СВС процесса и его применения

А.А. Возняковский¹, А.П. Возняковский², Кидалов С.В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

²ФГУП “НИИСК”, Санкт-Петербург

УДК: 620.3

Семейство графеновых наноструктур (ГНС) успешно используется исследователями в различных отраслях для создания новой продукции за счет своих рекордных прочностных, теплофизических и электрических характеристик. Однако, не смотря на десятки тысяч работ по успешному применению графеновых наноструктур, их внедрение в реальную промышленность до сих пор не произошло по ряду причин.

Во-первых, из-за несовершенства методик синтеза ГНС (как по подходу “снизу-вверх”, так и по подходу “сверху-вниз”) на данный момент нельзя синтезировать большие объемы ГНС высокого качества с приемлемой себестоимостью. Во-вторых, из-за сильной зависимости свойств ГНС от их дефектности имеется сильное расхождение между ожидаемыми результатами и экспериментальными данными, а также несовпадения результатов у различных авторов. Поэтому множество научных групп ищут новые методики синтеза ГНС.

В данной работе мы докладываем о новой методике синтеза высококачественных ГНС, а именно малослойного графена (количество слоев не более 5) в условиях самораспространяющийся высокотемпературного синтеза (СВС) из циклических биополимеров в т.ч. из различных отходов, таких как кора, лигнин, загрязненная целлюлоза [1]. Данная методика является легко масштабируемой и позволяет синтезировать большие объемы продукта в виде порошка или суспензии (на данный момент развернуто производство до 10 кг/мес.) высокого качества, а именно количеством слоев не более 5 и полным отсутствием дефектов Дильса-Альдера.

Синтезированный малослойный графен экспериментально показал свою высокую эффективность в качестве сорбента радионуклидов и микотоксинов, в качестве добавки при создании композитов на основе полимерных и металлических матриц, в качестве матрицы для создания многоразовых катализаторов, матрицы для создания эффективных биопрепаратов для ликвидации загрязнений окружающей среды нефтепродуктами, а также в качестве материала катодов с целью получения низкочастотной полевой эмиссии.

На основе полученных экспериментальных данных было выдвинуто предположение, что ансамбль частиц ГНС можно рассматривать в качестве полимера, свойства которого обусловлены свойствами всего ансамбля частиц.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-53-04026 Бел_мол_а.

1. Voznyakovskii A.P., Vozniakovskii 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. №4. P. 657.
2. Voznyakovskii A.P., Neverovskaya A. Yu., Vozniakovskii A.A., Kidalov S.V. A Quantitative Chemical Method for Determining the Surface Concentration of Stone–Wales Defects for 1D and 2D Carbon Nanomaterials // *Nanomaterials*. 2022. V. 12. №5. P. 883.

**Получение и сравнительное исследование нанопорошков и
керамических электролитных материалов на основе систем CeO₂-Sm₂O₃ и
CeO₂-Nd₂O₃**

Д.А. Дюскина

*Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов "Прометей"
имени И.В. Горынина Национального исследовательского центра "Курчатовский институт", г.
Санкт-Петербург
УДК: 544.6.018.464*

В настоящее время активно разрабатываются альтернативные источники получения электроэнергии, в частности твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ), способные с высокой эффективностью конвертировать химическую энергию органического топлива непосредственно в электроэнергию.

Одной из основных частей ячейки топливного элемента является электролит. Электролиты различают по их ионно-транспортному механизму: анионные, протонные и ионносмешанные. Для среднетемпературных ТОТЭ, работающих при температуре 400-800 °С, в качестве электролита используются материалы с кислород-ионной проводимостью на основе диоксида церия.

Важной задачей получения эффективных электролитных материалов для ТОТЭ является разработка оптимальной, экономичной технологии их получения. Одним из путей решения этой задачи является использование жидкофазных, низкотемпературных методов синтеза. Применение данных методов синтеза позволяет получить высокодисперсные нанопорошки и нанокерамические материалы на их основе и при этом за счет снижения температуры синтеза порошков и спекания керамики уменьшить энергозатраты [1].

Для функциональности полученных электролитных материалов они должны обладать оптимальной плотностью и низкой пористостью. Важность этих характеристик обусловлена тем, что электролиты должны быть газонепроницаемыми. Также для эффективной работы ТЭ электролит должен обладать высокими значениями электропроводности и оптимальным уровнем ионной проводимости [2].

Жидкофазный синтез ксерогелей, нанодисперсных порошков состава (CeO₂)_{1-x}(Sm₂O₃)_x и (CeO₂)_{1-x}(Nd₂O₃)_x (x = 0,05; 0,10; 0,20) был осуществлен методом соосаждения гидроксидов с низкотемпературной обработкой. Консолидация керамических образцов осуществлялась методом холодного одноосного прессования и спеканием – 1300 °С.

В результате сравнительного анализа полученных результатов было установлено, что метод совместного осаждения гидроксидов позволяет синтезировать высокодисперсные порошки и плотную, малопористую нанокерамику в обеих исследованных системах, обладающую электропроводностью в интервале 0,2-3,3·10⁻² См/см.

Полученные керамические наноматериалы по своим механическим и электротранспортным свойствам перспективны в качестве твердооксидных электролитов среднетемпературных топливных элементов.

1. Prasad D. H. et al. Synthesis of nano-crystalline Ce_{0,9}Gd_{0,1}O_{1,95} electrolyte by novel sol-gel thermolysis process for IT-SOFCs. // Journal of the European Ceramic Society. 2008. V. 28. P. 3107–3112.
2. Пономарева А. А. и др. Современное состояние и перспективы изготовления и эксплуатации топливных элементов, работающих на метане (обзор) // Физика и химия стекла. 2016. Т. 42. № 1. С. 7-32.

Синтез электрокатализаторов для электрохимических устройств с твердым полимерным электролитом

Иванова Н.А.¹, Меншарапов Р.М.¹, Спасов Д.Д.^{1,2}, Засыпкина А.А.¹, Синяков М.В.^{1,3}, Фатеев В.Н.¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

²Национальный исследовательский университет "МЭИ", 111250, Москва, ул. Красноказарменная, д. 14

³РХТУ им. Д. И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9

На эффективность электрохимического устройства большое влияние оказывают формирование каталитического слоя, адгезия слоя к поверхности мембранного или микропористого электродного слоя и равномерность его нанесения [1]. Стабильность электрокатализаторов и каталитических слоев остается важнейшей задачей для обеспечения надежности функционирования и продления высокоэффективной работы электрохимических устройств с твердым полимерным электролитом [2]. В связи с этим представляет интерес разработка дизайна и формирование каталитического слоя с заданными свойствами в составе устройства.

Структура используемого электрокатализатора определяется его составом и методикой синтеза. В электрохимических устройствах используются электрокатализаторы в форме металлической черни (платина, иридий), нанесенные на углеродные носители (сажа, сложные углеродные структуры), а также гибридные электрокатализаторы с различными модификаторами, в том числе оксидами неметаллов. При этом определяющим фактором является разработка методов синтеза электрокатализаторов, позволяющих добиться эффективного восстановления активного компонента в электрокаталитическом слое, равномерного распределения частиц металла, их закрепления на поверхности носителя, при этом сохранив исходную структуру и свойства подложки [3]. В настоящем исследовании представлены различные методы синтеза электрокатализаторов, в том числе химические и физические.

Для синтеза катализаторов используются плазмохимические методы (магнетронное распыление) [4] и современные химические технологии [5]. В случае химических методов в качестве прекурсора обычно используют растворы кислот и солей, например гексахлорплатиновую и гексахлориридиевую кислоты. В качестве восстановителя могут быть использованы этиленгликоль, раствор боргидрида натрия, газообразный водород, что также позволяет варьировать условия синтеза: время, температуру, состав газов, рН в широком диапазоне.

Рассмотрены различные методы синтеза электрокатализаторов, их достоинства и недостатки, а также области применения. Плазмохимические методы позволяют провести модифицирование углеродных материалов-носителей катализаторов оксидами металлов неплатиновой группы. Электрокаталитический слой, полученный методом магнетронного распыления, характеризуется лучшими свойствами: низкой скоростью коррозии углеродной подложки и долговечностью по сравнению с порошковыми катализаторами, полученными химическими методами [3].

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации МК-4120.2022.1.3.

1. D. Banham and S. Ye, ACS Energy Lett. 2017, T. 2 (3), С. 629-638.
2. J. Speder et al., J. Power Sources. 2014. T. 261. С. 14-22.
3. N.A. Ivanova, et al. International Journal of Hydrogen Energy. 2021. T. 46. №. 34. С. 18093-18106.
4. N.A. Ivanova, et al. International Journal of Hydrogen Energy. 2019. T. 44. №. 56. С. 29529-29536.
5. S.A. Grigoriev, et al. Materials. 2018. T. 11. №. 8. С. 1405.

Использование пучково-плазменных технологий для повышения функциональных свойств деталей нефтегазового оборудования

С.А. Леухин¹, П.А. Шидберский¹

¹ АО НИИЭФА им. Д.В. Ефремова» (АО «НИИЭФА»), г. Санкт-Петербург

УДК: 53.06, 53.04, 539.5

В качестве основных целей выдвигаемых при использовании пучково-плазменных технологий для повышения функциональных свойств изделий в современном машиностроении, наиболее часто выступают повышение коррозионной стойкости и износостойкости, что особенно важно для энергонагруженных деталей и узлов нефтегазового промыслового оборудования, инструмента и труб, эксплуатируемых в экстремальных условиях большинства месторождений нефти и газа Западной Сибири.

Среди методов нанесения коррозионно-стойких и износостойких покрытий на материалы, наибольшее распространение получили газотермическое напыление и наплавка защитного слоя при давлениях порядка атмосферного, а также ионно-плазменные методы при пониженных давлениях (вакуумно-дуговое и магнетронное напыление). Однако, при их использовании, основной проблемой является зона контакта материала покрытия с поверхностью изделия [1].

Альтернативным способом повышения эксплуатационных свойств рабочей поверхности деталей нефтегазового оборудования, могут быть технологии, направленные на изменения структуры и химического состава приповерхностного слоя. К таким технологиям можно отнести технологии ионного легирования и формирование защитного слоя пучками различных ионов, а также модификацию поверхностных свойств деталей мощными импульсными электронными пучками.

Основным преимуществом технологии ионного легирования является возможность введения строго заданного количества любого элемента в приповерхностный слой металлов, получая уникальные характеристики по коррозионной и износостойкости. Такая технология позволяет создавать в приповерхностном слое сплавы с определенными свойствами на глубины 0,1-2 мкм, а также формировать на поверхности пучками ионов защитный слой заданной толщины и состава, используя легируемый слой как переходный. Создаваемый защитный слой, обладая высокой механической прочностью, является единым целым с основным материалом обрабатываемого изделия [2].

Обработка мощными импульсными электронными пучками материалов приводит к формированию nano-структурированных поверхностных слоев с повышенной износостойкостью, коррозионной стойкостью и динамической прочностью. При воздействии мощного импульсного электронного пучка на материал его слой глубиной порядка пробега частиц в данном материале может быть нагрет очень быстро до температур фазовых переходов (плавление, испарение, аустенитное превращение и т.д.). После окончания импульса пучка происходит быстрое охлаждение обработанного слоя за счет теплопроводности в глубь материала. Скорость нагрева может достигать 10^8 - 10^{11} град/сек, максимальная скорость охлаждения (10^7 - 10^9 град/сек).

Для описания теплового источника рассматривалось пространственно-энергетическое распределение пучка электронов в веществе моделированием большого числа траекторий электронов в материале и выполнен расчет температурных полей в образцах под действием импульсного электронного пучка.

1. Р.Н. Плоmodityнов, А.А. Шмидберская, С.С. Штоколов, В.Н. Сызранцев, К.И. Ткаченко Сравнительный анализ технологий модификации поверхности деталей нефтегазового оборудования // Наука и техника, 2, 35-40 (2018).
2. А.А. Шмидберская, П.А. Шмидберский, А.А. Кислицын Использование пучков тяжелых ионов для обработки поверхности твердых тел // Теплофизика, гидродинамика, теплотехника: Сб. статей. Тюмень: ТюмГУ, 2008. Вып.4. С. 116–122.

Нанокomпозиционные покрытия системы Ni-P-Wc эквивалентным содержанием фосфора и вольфрама в сплаве

М.В. Меркулова¹, А.В. Красиков¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург

УДК 621.357.7

Электрохимические композиционные покрытия представляют интерес возможностью получения такого состава сплава, который нельзя синтезировать металлургическими методами. Термической обработкой электрохимических покрытий можно целенаправленно воздействовать на специфическую структуру осадков, формируемую в неравновесных условиях электрокристаллизации, а также получать повышенные эксплуатационные характеристики [1], исследуя физико-химические свойства процессов, протекающих в материале. Наиболее распространенным промышленным примером является покрытие системы «никель-фосфор». Термообработка аморфного твердого раствора приводит к его разложению и выделению соединений Ni₃P, а также к увеличению микротвердости до 7 – 8 ГПа [2], что часто бывает недостаточно для эффективной защиты деталей. Для упрочнения фазы твердого раствора никеля вводят легирующие элементы. В этом аспекте весьма выгодно легирование вольфрамом, поскольку в количествах до 11,8 ат.% он образует твердый раствор в никеле.

В данной работе предлагается сравнительное исследование влияния режимов термической обработки на фазовый состав и микротвердость покрытий системы Ni-P-Wc помощью рентгеноструктурного анализа изучены процессы формирования армирующей фазы Ni₃P.

Для синтеза покрытия был подобран состав электролита, позволяющий легировать систему «никель-фосфор» вольфрамом и получить равное атомное соотношение фосфора и вольфрама в сплаве, благодаря чему аморфное покрытие представляло собой твердый раствор вольфрама и фосфора в никеле. Его микротвердость составляла 7,6 ГПа. При последующей термообработке от 1 до 7,5 часов при 350°C фазовый состав сплава не менялся. С увеличением продолжительности термообработки с часа до 2,5 часов при температуре 350°C микротвердость покрытия возрастает с 10,5 ГПа до 11,6 ГПа, снижаясь при последующем увеличении выдержки. Это характерно для всех исследованных температур. Повышение температуры термической обработки с 350°C до 500-600°C повышает микротвердость сплавов Ni-P-W с равным атомным соотношением вольфрама и фосфора (достигая максимального значения 13,2 ГПа при 600°C за 2,5 часа), за счет кристаллизации упрочняющей фазы Ni₃P, однако при последующем увеличении температуры до 750°C микротвердость покрытия снижается предположительно за счет роста зерна матрицы.

По результатам исследований скорость коррозии аморфного покрытия системы Ni-P-W в растворе хлорида натрия в течение 300 часов составляет 0,005 г/м²ч (0,1 мм/год), что, в соответствии с пятибалльной шкалой коррозионной стойкости материалов в агрессивной среде, позволяет классифицировать нанокomпозиционное покрытие системы Ni-P-W как «весьма стойкий» материал.

1. Ковенский И.М. Отжиг электроосажденных металлов и сплавов. Тюмень: ТюмГНГУ, 1995. – 92 с.

2. Красиков А.В. Влияние концентрации гипофосфита натрия в пирофосфатном электролите на состав и свойства электроосажденных покрытий Ni-P // Вопр. материаловедения. - 2017. - №1(89). - С. 123-129.

Моделирование остановки трещины

Е.Д.Назарова¹, Филин В.Ю.²

^{1,2} НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

УДК: 539.219.2

Особый интерес при моделировании старта и распространения разрушения представляет учёт его конкурирующих механизмов, что позволяет получить оценки вида изломов и работы разрушения образцов и конструкционных элементов различной геометрии. Известные зарубежные попытки такого моделирования, требующие измельчения сетки конечных элементов (КЭ) в окрестности вершины надреза, приводят к тому, что вычислительных мощностей хватает только на анализ старта разрушения. В России моделирование макровязкого разрушения образцов с надрезом проводилось коллективом авторов, среди которых А.Б.Арабей, Т.С.Есиев, А.О.Струин и др. [1-2]. Ими использовано равномерное разбиение модели на КЭ достаточно крупного размера (порядка 0.5 мм), что позволило рассчитать и стадию распространения разрушения. При этом неизбежно возникает вопрос сеточной зависимости результатов и необходимость калибровки модели.

Выполняемое нами моделирование также основано на указанном предположении. При этом, в отличие от других авторов, при выполнении расчетов применяется несколько условий разрушения.

Первое условие в модели относится к хрупкому разрушению по достижению предельной жёсткости напряжённого состояния и калибруется по сеточно независимому параметру - коэффициенту интенсивности напряжений. Второе условие следует из классической модели Хэнкока-Маккензи-Райса и относится к накопленной деформации при вязком отрыве, оно калибруется введением функции f , учитывающей соотношение значений, получаемых в узлах и в элементах сетки КЭ заданного размера. Третье условие связано с достижением в вершине трещины некоторой доли теоретической прочности и относится к вязкому разрушению срезом (формированию губ среза).

Для решения модельных задач разработана процедура получения «истинной» диаграммы деформирования материала, комбинирующая учёт особенностей плато Людерса и степенную зависимость напряжений при деформационном упрочнении. Были смоделированы судостроительные стали нескольких групп прочности, с номинальным пределом текучести от 400 до 900 МПа.

К настоящему моменту получены следующие основные результаты: показана возможность выполнения моделирования для тел с различной геометрией надреза, от круглого (образцы ТКБ) до острого (DWTT), получено адекватное расположение в изломе областей хрупкого скола, вязкого отрыва и среза, в модели достигается величина накопленной пластической деформации, не противоречащая результатам экспериментальной оценки по изменению твёрдости. Проводится установление корреляции параметров материала с работой разрушения образца, которая позволит перейти к количественным оценкам результатов испытаний падающим грузом по ГОСТ 30456-2021.

Литература

1. М.А.Штремель и др. Силы и деформации при испытании падающим грузом (ИПГ-DWTT) //Деформация и разрушение материалов. 2016, №9. С. 36-47.
2. Абакумов А.И. и др. Численное моделирование испытания падающим грузом вязкой трубной стали при трехточечном изгибе //Проблемы прочности и пластичности, т.82, №4, 2020г. С.493-506.

Квантовые точки индия на поверхности GaAs(001) и AlAs(001): DFT моделирование для оценки мобильности

В.А. Ролдугин¹, М.А. Солдатов¹, М.С. Солодовник², С.В. Балакирев²

¹ Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

² Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета, Таганрог

УДК: 66.017, 544.18

Полупроводниковые квантовые точки представляют особый интерес благодаря своему многообещающему применению в оптоэлектронике и нанофотонике. Капельная эпитаксия расширяет набор материалов, подходящих для их синтеза, и обеспечивает независимый контроль размера, плотности на поверхности подложки и химического состава получаемых квантовых точек. Однако механизм зарождения капель, образования ансамблей и последующего роста островков все еще остается недостаточно изученным. Более того, в зависимости от экспериментальных условий при капельной эпитаксии могут реализовываться разные механизмы роста, в результате чего конкретный режим роста остается неопределенным [1, 2].

В данной работе был изучен механизм роста квантовых точек индия на наборе различных поверхностей GaAs(001) и AlAs(001). Для этого выполнялось теоретическое моделирование в рамках теории функционала плотности, которое позволило исследовать динамику поведения адатомов индия и оценить их мобильность в процессе осаждения. В процессе геометрической оптимизации адатом с заведомо избыточного расстояния релаксирует на поверхность и занимает наиболее энергетически выгодное положение, вызывая при этом структурную перестройку поверхностных слоев атомов подложки. Используя такие расчеты, была оценена «эффективная» энергия связи адатома индия с подложкой для различных конфигураций дополнительных монослоев атомов Ga или Al и смачивания (слой атомов того же типа, что и адсорбируемый).

Было обнаружено, что смачивание толщиной в один монослой снижает энергию связи адатома индия примерно на 44% на обеих подложках, что является абсолютным результатом среди аналогичных конфигураций с одним промежуточным монослоем. На практике это приводит к повышению мобильности адатомов и последующему снижению плотности капель на поверхности, о чем сообщают коллеги [3]. Напротив, добавление монослоя алюминия на поверхность GaAs(001) повышает энергию связи адатома на 7% по сравнению с чистой поверхностью, что также подтверждается хорошо известными литературными данными о понижении мобильности вызванном алюминием [4]. Вместе с тем при сравнении чистых подложек GaAs(001) и AlAs(001) вариант с алюминием тоже оказывается обладает большей энергией связи.

Таким образом, полученная в рамках DFT «эффективная» энергия связи адатомов индия определяет (обратно пропорционально) их мобильность, а чем выше мобильность, тем более вероятно образование квантовых точек на поверхности GaAs(001) и AlAs(001).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2021-1363).

1. Quantum dot heterostructures. / Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N.: John Wiley & Sons, 1999.
2. Nucleation Theory and Growth of Nanostructures. NanoScience and Technology. / Dubrovskii V. G.: Springer Berlin Heidelberg, 2013. NanoScience and Technology.
3. Balakirev S. V., Solodovnik M. S., Eremenko M. M., Konoplev B. G., Ageev O. A. Mechanism of nucleation and critical layer formation during In/GaAs droplet epitaxy // Nanotechnology. – 2019. – Т. 30, № 50. – С. 505601.
4. Sanguinetti S., Watanabe K., Tateno T., Gurioli M., Werner P., Wakaki M., Koguchi N. Modified droplet epitaxy GaAs/AlGaAs quantum dots grown on a variable thickness wetting layer // Journal of Crystal Growth. – 2003. – Т. 253, № 1. – С. 71-76.

Синтез и идентификация фуллеренолов с теллуром

*И.С. Рябокоть¹, В.П. Седов¹, Д.Н. Орлова¹, А.А. Ямщикова^{1,2}, Д.А. Румянцева¹,
В.Г. Зиновьев¹, А.В. Титова^{1,2}, П.Л. Молканов¹, В.А. Шилин¹, А.А. Борисенкова^{1,2},
М.В. Суясова^{1,3}*

¹НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

²СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

³Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России, Санкт-Петербург

УДК: 547-68

Разработка новых радиофармпрепаратов (РФП) для тераностики онкологических заболеваний не теряет своей актуальности по сей день. Препараты на основе радиоизотопов йода (¹²³I, ¹²⁴I, ¹²⁵I, ¹³¹I) широко используются для терапии заболеваний щитовидной железы. Поскольку вследствие своих химических свойств радиоiod активно участвует в обменных процессах в организме, его необходимо надежно изолировать от взаимодействия со средой организма. Этого можно достигнуть, поместив радиоизотоп йода внутрь фуллереновой молекулы. Водорастворимая форма этого комплекса в виде фуллеренола подавляет биотоксичность и химическую активность йода. При этом важно подчеркнуть, что фуллеренолы имеют высокий процент выживаемости при облучении [1], что делает их перспективными «нанокапсулами» для создания йодсодержащих радиофармпрепаратов.

Широко известными способами получения изотопов йода является реакторное облучение мишеней и облучение на циклотроне. При этом в первом случае получают ¹²⁵I, ¹³¹I изотопы по схемам: ¹²⁵Te → ¹²⁵I + e⁻, ¹³⁰Te (n, γ) ¹³¹Te β⁻ → ¹³¹I; во втором ¹²³I, ¹²⁴I по схеме Te (p, x) I.

Целью данной работы является разработка методики синтеза водорастворимых фуллеренолов с йодом для создания РФП.

Для решения этой задачи был использован метод, разработанный в лаборатории химии и спектроскопии углеродных материалов и успешно апробированный при получении эндометаллофуллеренолов с 3d-элементами и лантаноидами [2,3]. Согласно этому методу сначала был синтезирован фталоцианин теллура, проведен его пиролиз в среде инертного газа. Теллуросодержащий пиролизат был использован для приготовления композитных электродов для синтеза фуллеренолов электродуговым способом. Из полученного углеродного конденсата была извлечена смесь Te-содержащих фуллеренолов, которая затем методом гидроксирования раствором перекиси водорода была переведена в водорастворимую форму. Были подобраны условия электродугового синтеза (состав электрода, ток) для эффективного выхода продукта. С помощью рентгено-флюоресцентного и элементного анализов было доказано наличие теллура в образце, с помощью ИК-спектроскопии изучены гидроксированные фуллерены.

После облучения протонами с энергией 1 ГэВ теллуросодержащего фуллеренола в гамма-спектре наблюдались изотопы I-123, I-124, I-131, что свидетельствует о возможности создания радиофармпрепаратов на основе водорастворимых йодсодержащих фуллеренолов.

1. Сжогина А.А., Шилин В.А., Седов В. П., Лебедев В. Т. *Кристаллография*. 2016. Т. 61, № 4. С. 639-642.

2. Седов В.П., Сжогина А.А., Суясова М.В., Шилин В.А., Лебедев В.Т. Способ получения водорастворимых гидроксированных производных эндометаллофуллеренолов лантанидов. Патент РФ № 2659972, 2018.

3. Седов В. П. и др. Способ получения эндофуллеренолов 3d-металлов. Патент РФ № 2664133 С1, 2018.

Йодотранспортный метод синтеза композиционного порошка для напыления функциональных покрытий системы Ti/HfV₂ микроплазменным методом

*М. Е. Гошкодеря¹, Т. И. Бобкова¹, С. П. Богданов², А. А. Каширина¹,
М. В. Хроменков¹, Н. А. Сердюк¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург

² Санкт-Петербургский государственный технологический институт, Санкт-Петербург

УДК 621.793.74:621.762.2: 544.778.4

Наиболее частой причиной выходов из строя ответственных деталей является износ контактных поверхностей. Для увеличения срока службы стандартных элементов конструкций активно применяются различные методы напыления, в том числе с использованием композиционных материалов.

В связи с активным освоением арктических и северных регионов необходимо учитывать, что используемые в технике материалы должны обладать устойчивостью в коррозионной среде при воздействии переходов отрицательных и положительных температур. Чтобы изготовить конструкционные элементы многокомпонентных узлов техники необходимо правильно подбирать материалы, которые смогут обеспечить им требуемые характеристики, такие как твердость, толщина покрытия и т.д. [1,2].

В качестве перспективной системы материалов для напыления функциональных покрытий на поверхности трубопроводов, элементов запорной арматуры, элементов газотурбинных двигателей, эксплуатирующихся в условиях арктического применения, в представленной работе рассматривается композит системы «ядро-оболочка» из порошков титана марки ПТОМ-1 и диборида гафния (ТУ 6-09-03-418-76). За счет индивидуальных свойств выбранных компонентов, таких как высокая коррозионная стойкость, сопротивление усталостному разрушению, высокая удельная прочность, низкий модуль упругости, малая плотность, хладостойкость у титана и высокая тугоплавкость, теплопроводность, твердость, а также металлоподобность у диборида гафния, появляется возможность создать материал, свойства которого будут удовлетворять современным требованиям арктического машиностроения.

Цель настоящего исследования – йодотранспортный синтез композиционного порошка для напыления функциональных покрытий системы Ti/HfV₂ микроплазменным методом.

Работа была выполнена в рамках поддержанного Российским Научным Фондом Проекта №21-73-30019.

Экспериментальные исследования выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Состав, структура и свойства конструкционных и функциональных материалов» НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования – соглашение № 13.ЦКП.21.0014 (075-11-2021-068). Уникальный идентификационный номер - RF----2296.61321X0014.

1. Goshkoderya M.E., Bobkova T.I. Development and research of composite coatings of Ti-B System sprayed by microplasma method // ICMTMTE 2021, Key Engineering Materials, ISSN: 1662-9795, Vol. 910, pp. 1136-1141.
2. Гошкодеря М.Е., Бобкова Т.И., Старицын М.В. Исследование процесса синтеза и свойств полученных металломатричных композиционных порошков системы Ti/TiB₂ // Журнал «Вопросы материаловедения», 2021, №2 (106). – с. 66-74.

Особенности электропроводности никель-саленовых полимеров для энергозапасающих и электронных устройств

Е.А. Смирнова, И.А. Чепурная

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

УДК: 544.6, 621.382, 621.355

Молекулярно- и наноструктурированные полимерные полупроводники со смешанной электронно-ионной проводимостью являются перспективными функциональными материалами для энергонакопительных и электронных устройств. Известными представителями таких материалов являются органические и элементарноорганические сопряженные цепочечные структуры. Встраивание металлических ионов в цепи проводящих полимеров предоставляет дополнительные возможности для более гибкого управления их свойствами за счет варьирования природы металла и интенсивности взаимодействий в системе «металл-сопряженный полимер». Полимерные полупроводники с внедренными металлическими центрами, характеризующиеся смешанным электронно-ионным механизмом проводимости, можно получить путем полимеризации соединений переходных металлов с редокс-активными лигандами, например, комплексов никеля (II) с саленовыми лигандами [1,2].

Ранее нами была продемонстрирована возможность применения никель-саленовых полимеров в качестве модифицирующих электродных слоев в гибридных суперконденсаторах (ГСК) [1] и органических электрохимических транзисторах (ОЭХТ) [2]. В основе функционирования данных устройств лежат одни и те же комплексно взаимосвязанные фундаментальные физические процессы, протекающие в объеме полимерного слоя и на границах раздела фаз полимер-подложка и полимер-раствор электролита: электронный транспорт, ионный транспорт и взаимодействие между подсистемами электронных и ионных носителей заряда. Данная работа посвящена углублению системных представлений об особенностях смешанной электронно-ионной проводимости никель-саленовых полимеров.

В работе изучалось изменение электропроводности полимерных комплексов никеля (II) с лигандами N,N'-бис(салицилиден)этилендиамин (поли-[NiSalen]), N,N'-бис(3-метоксисалицилиден)этилендиамин (поли-[NiCH₃OSalen]), 2,3-диметил-N,N'-бис(салицилиден)бутан-2,3-диамин (поли-[NiSaltmen]) и 2,3-диметил-N,N'-бис(3-метоксисалицилиден)бутан-2,3-диамин (поли-[NiCH₃OSaltmen]) при электрохимическом легировании (допировании) анионами фонового электролита в процессе перехода полимера между незаряженным (нейтральным) и окисленным состояниями в ацетонитрильном растворе, содержащем 0.1 моль/л Et₄NBF₄. Исследование полимерных комплексов, синтезированных на гребенчатых платиновых микроэлектродах (MicroX Technologies), осуществлялось с помощью метода *in situ* измерения проводимости, позволяющего количественно охарактеризовать электронный транспорт даже в тех полимерных материалах, перенос заряда в которых лимитируется транспортом ионов.

Установлено, что молекулярный состав существенно влияет на характеристические параметры зависимости проводимости полимеров от управляющего напряжения, определяющего уровень допирования материала, а также на стабильность параметров электронного транспорта при перезаряде. Определены перспективные полимеры для применения в ГСК и ОЭХТ, с учетом различий в предельных уровнях допирования материалов в данных устройствах.

1. Чепурная И.А. и др. Модификация электродов суперконденсаторов полимерными металлокомплексами: методы и результаты // Электрохимия. 2012. Т. 48. № 5. С. 590–597.
2. 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.

Применение электрохимического водородного насоса в условиях характерных для систем топливного цикла термоядерного реактора

Д.Д. Спасов^{1,2}, Н.А. Иванова¹, Б.В. Иванов¹, Р.М. Менишарпов¹, М.В. Сияжков^{1,3}, В.Н. Фатеев¹

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва, РФ*

² *Национальный исследовательский университет «МЭИ», г. Москва, РФ*

³ *Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, г. Москва, РФ*

Одной из важнейших систем термоядерных установок является топливный цикл, который представляет собой совокупность подсистем направленных на обеспечение топливом (изотопами водорода) плазменной камеры, инжекцию топлива в плазму и последующую переработку и очистку топлива, извлеченного из плазменной камеры, примером таких систем могут служить ТЦ ЖЕТ [1], ИТЭР [2], SFETR [3] и ДЕМО-ТИН [4].

ЭВН является новой, активно развивающейся технологией, которая, несмотря на широкую область применения, высокий КПД, возможность очищать и компримировать водород в одну стадию, в настоящее время применяется только в ограниченной сфере [5]. В первую очередь ЭВН интересен для водородной энергетики, однако следует отметить, что состав разделяемых газовых смесей в процессах, упомянутых выше, во многом похож на газовые смеси в ТЦ термоядерных установок [5].

ЭВН может быть применен в различных частях ТЦ для выделения, очистки или компримирования водорода, а также в аналитических целях для концентрирования малых количеств водорода. В настоящее время для разделения водородсодержащих смесей в ТЦ термоядерных установок, кроме ЭВН, рассматриваются: мембранные реакторы на основе палладий-серебряного сплава, криоадсорбционные колонны, адсорбционные колонны на основе гидридообразующих материалов. Наиболее разработанным является метод разделения в мембранных реакторах, который позволяет получить высокочистый водород в одну стадию и устойчив к радиационному воздействию трития. Однако, он требует значительного перепада давления с разных сторон мембраны для осуществления процесса разделения с заметной скоростью, что, во-первых, приводит к необходимости в дополнительном оборудовании (компрессоры и вакуумные насосы), и во-вторых, к увеличению количества дорогостоящего и радиационно-опасного трития в системе.

В работе будет рассмотрено использование электрохимического водородного насоса в следующих системах ТЦ:

- о откачка токамака;
- о выделение водорода из «выхлопных» газов;
- о выделение трития из водородсодержащих соединений (H₂O, CH₄ и др.);
- о выделение водорода из «бланкетного газа».

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22–29–01367

1. R. Lässer et al., Fusion Eng. Des., 1999. Т. 47. №. 2-3. С. 233-245.
2. M. Glugla et al., Fusion Eng. Des., 2007. Т. 82. №. 5-14. С. 472-487.
3. X. Wang, et al., J. Fusion Energy, 2019. Т. 38. №. 1. С. 125-137.
4. S. S. Ananyev, et al., Fusion Eng. Des., 2020. Т. 161. С. 111940.
5. L. Vermaak, et al, Membranes (Basel)., 2021. Т. 11. №. 4. С. 282.

Эндометаллофуллерены лютеция: структура и свойства

*А.В.Титова^{1,2}, В.П. Седов², Д.Н. Орлова², А.А. Сергеев^{1,2}
А.А. Борисенкова^{1,2}, Ж.Б.Лютова^{1,2}, М.А.Маркова²
М.В. Суюсова^{1,3}*

¹Курчатовский институт – ПИЯФ, Гатчина

²СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

³СПбГУ ГПС МЧС России МЧС России, Санкт-Петербург

УДК: 547-68

Лютеций-177 широко используют в тераностике, современном методе лечения, заключающемся в терапии и диагностике злокачественных новообразований, кроме того, данный радионуклид используют при борьбе с раком предстательной железы [1,2]. Эндометаллофуллерен лютеция-177 может послужить основой для радиофармпрепаратов [3]. Радионуклид, помещенный внутрь фуллеренового каркаса, становится химически инертным и не оказывает токсичное воздействие на организм, при этом его ядерно-физические свойства сохраняются.

В настоящей работе были подготовлены графитовые электроды, содержащие оксид лютеция. В процессе электродугового испарения была получена фуллерен-содержащая сажа, при этом подобраны параметры проведения процесса, при которых можно добиться наибольшей производительности. Экстракцией диметилформамидом с добавкой 0,2 % гидразин-гидрата был получен экстракт [4, 5], в котором присутствовали, как пустотелые фуллерены, так и до 8% эндометаллофуллеренов. Структура экстракта была исследована методами ИК- и масс-спектрометрии. Методом масс-спектрометрии обнаружено присутствие эндометаллофуллеренов, содержащих не только один, но и два и три атома лютеция. Разработан метод обогащения получаемого экстракта по целевому продукту, а также переводу его в биосовместимую форму посредством гидроксирования с получением $\text{Lu}@C_{2n}(\text{OH})_{28}$. Водорастворимый продукт проанализирован. Полученные результаты обсуждаются.

1. Кайремо К., Йознсуу Т. Лечение метастатического рака простаты с помощью лютеций-177-ПСМА-примеры случаев удивительных реакций //Вестник урологии. – 2018. – №. 1. – С. 65-75;
2. Солодкий В. А. и др. Последние достижения в лечении метастатического рака предстательной железы. – 2021;
3. Dallas P. et al. Endohedral Fullerenes: Optical Properties and Biomedical Applications //Carbon Nanomaterials Sourcebook: Graphene, Fullerenes, Nanotubes and Nanodiamonds; Taylor & Francis: Boca Raton, FL, USA. – 2016. – С. 255-270;
4. Sedov V. P. et al. Deep Extraction of Fullerene-Containing Carbon Black with a Polar Solvent: Analysis of Products //Russian Journal of Applied Chemistry. – 2020. – Т. 93. – №. 4. – С. 527-539;
5. Седов В. П. и др. Способ получения эндофуллеренов 3d-металлов. – 2018.

Ретроспективный анализ детонационного синтеза наноалмазов
***А.Д. Трофимук¹, Л.В. Шаронова¹, С.В. Кидалов¹, А.В. Швидченко¹, Д.А. Кириленко¹,
Е.Ю. Стовяга¹, А.Т. Дидейкин¹***

¹*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург*
УДК: 538.911, 539.219.1, 548.231, 548.4, 54.057

Внушительное число работ по различным применениям детонационного наноалмаза (ДНА) – например, для медицинских целей, в качестве точек роста алмазных плёнок или в качестве функциональной добавки многоцелевых композиций [1] – связано не в последнюю очередь с глубоким пониманием процессов, происходящих при синтезе этого материала.

Ранее нами была предложена модель [2], объясняющая рост и образование алмазных частиц в закрытом объёме из избыточного углерода продуктов реакции взрывчатых веществ. Предложенная ранее модель объясняла, в том числе, и процесс деагломерации [3], который позволял получать гидрозолы отдельных частиц ДНА с медианным размером частиц 4.5 нм.

Однако без внимания до сегодняшних дней оставался выход процесса деагломерации. Так, до 50% массы очищенного порошка ДНА не удаётся деагломерировать.

В данной работе мы исследовали сверхпрочные агрегаты ДНА, стойкие к известным (и многократно апробированным [4]) методам деагломерации. По данным рентгеновской дифракции, спектрофотометрии, рамановской спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, динамического светорассеяния и порозиметрии мы сделали вывод о структуре таких образований. Это позволило нам сделать ретроспективный анализ и предложить новую непротиворечивую модель формирования частиц при детонационном синтезе.

Работа выполнена в рамках проекта ФТИ им. А.Ф. Иоффе (№ 0040-2019-0013). ПЭМ-исследования проводились на оборудовании ФЦКП «Материаловедение и характеристика в передовых технологиях» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Рентгеновские исследования проведены на оборудовании Инжинирингового центра СПбГТИ(ТУ).

1. Detonation Nanodiamonds: Science and Applications // A. Vul', O. Shenderova, eds. New York: Jenny Stanford Publishing, 2013. 346 p.
2. Dideikin A.T. et. al. Rehybridization of carbon on facets of detonation diamond nanocrystals and forming hydrosols of individual particles // Carbon. 2017. V.122. P. 737-745.
3. Eidelman E.D. et al. A stable suspension of single ultrananocrystalline diamond particles // Diamond and Related Materials. 2005. V. 14. P. 1765–1769.
4. Aleksenskii A.E. et al. Effect of Particle Sizes on the Efficiency of Fluorinated Nanodiamond Neutron Reflectors // Nanomaterials. 2021. № 11. 3067.

Сравнение структуры и механических свойств деформированных полуфабрикатов и изделий, полученных методом горячего изостатического прессования

И.М. Хачатурян¹, С.Д. Другачук¹, Ю.Ю. Малинкина¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

Благодаря высокому уровню прочности при высокой вязкости разрушения титановые сплавы широко применяют в современной морской технике и судостроении. Проведенные исследования титановых сплавов показали, что титановые сплавы можно подвергать различным технологическим операциям, в том числе прокатке, штамповке, литью, ковке, диспергированию в мельчайшие гранулы, компактированию и т.д. [1] При изготовлении изделий традиционными способами очень много металла уходит в отходы, поэтому для экономии металла за счет изготовления изделий с высокой точностью и геометрией и сокращения механической обработки была рассмотрена возможность изготовления изделий из титановых сплавов с помощью современного метода – метода горячего изостатического прессования (ГИП) [2]. Использование порошкового титана является очень перспективным, ведь за счет изготовления деталей из гранул с помощью горячего изостатического прессования в стальных капсулах повышаются прочностные и пластические свойства [3,4].

Целями данной работы является сравнение структуры и механических свойств псевдо- α -титанового сплава, полученного традиционным методом (прокатом) и методом горячего изостатического прессования.

В работе были исследованы структуры деформированного и компактированного титановых сплавов и их механические свойства. Характерная особенность компактированного металла – более однородная и мелкозернистая структура изделий по сравнению с крупнопластинчатой структурой, свойственной полуфабрикатам больших сечений.

Уровень механических свойств полуфабрикатов, произведённых методом ГИП, удовлетворяет требованиям нормативной документации, а также требованиям, предъявляемым к деформируемым полуфабрикатам аналогичных изделий.

Микроструктура заготовок псевдо- α -титанового сплава имеет внутрезеренную пластинчатую структуру первичного β -зерна с оторочкой α -фазы. Влияние термообработки на микроструктуру и её параметры не обнаружено. Микроструктура изделия в продольном и поперечном направлениях не имеет существенных отличий, что подтверждает изотропность свойств. Структура компактированного материала очень схожа с деформированной (с плитой), однако у компактированного – зерна меньше, благодаря чему повышаются прочность, твердость и ударная вязкость.

1. Кудрявцев А.С., Паноцкий Д.А., Хачатурян А.Г., Сапунов А.Л. Освоение производства цельнокатаных колец, поковок и прутков из морских титановых сплавов в условиях ПАО "Русполимет", // Титан. – 2018. – №1. – С.33-40
2. Samarov V., Seliverstov D., Raison G., Goloveshkin V. Physical Principles of Shape and Densification Control during HIP // Proceedings of the 2011 International Conference on Hot Isostatic Pressing, Kobe, Japan. – 2011.
3. Александров А.В., Кузнецов С.Ю., Демченков Г.Г., Афонин Е.А. Перспективы дальнейшего развития и совершенствования гранульной металлургии // Титан. – 2015. – №3 – С. 39-41
4. Кузнецов С.Ю., Александров А.А., Афонин Е.А. Особенности получения гранул титана на установках центробежного распыления нового поколения // Титан. – 2015. – №4 – С. 41-44

Повышение служебных характеристик износостойких наплавки типа 09X32H8AM2 трубопроводной арматуры АЭУ за счет управления процессом структурообразования

И.С. Григорьев, к.т.н. С.Н. Галяткин, к.т.н. М.Н. Тимофеев

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

Приведены сравнительные характеристики износостойких материалов, применяемых в настоящее время для наплавки уплотнительных поверхностей трубопроводной арматуры атомных энергетических установок (АЭУ).

Показаны преимущества по технологическим свойствам наплавочных материалов типа 09X32H8AM2 в сравнении с другими типами, применяемыми при изготовлении трубопроводной арматуры АЭУ (190K62X29B5C2, 08X17H8C6Г и 13X16H8M5C5Г4Б).

Разработаны пути повышения служебных характеристик наплавочных материалов типа 09X32H8AM2 до уровня требований предъявляемых к уплотнительным поверхностям трубопроводной арматуры АЭУ за счет управления структурообразованием:

- 1) корректировка химического состава;
- 2) установление влияния термических обработок на структуру и свойства наплавленной поверхности;
- 3) применение порошковых материалов и разработка технологии плазменно-порошковой наплавки.

Показана перспективность применения наплавочных материалов типа 09X32H8AM2 для изготовления трубопроводной арматуры после реализации указанных мероприятий.

1. – Gauthier Beaurin, Jean-Philippe Mathieu, Elise Gauthier, Daniel Nelias, Michel Coret, et al.. Microstructural and mechanical properties evolutions of plasma transferred arc deposited Norem02 hardfacing alloy at high temperature. *Materials Science and Engineering: A*, Elsevier, 2011, 528 (15)
2. – Гладкий П.В., Переpletчиков Е.Ф., Рабинович В.И. Плазменная наплавка в энергетическом арматуростроении. – Технология, организация и механизация сварочного производства (НИИИНФОРМТЯЖМАШ), 1970, №2, с илл.
3. – Yuxiao Wu, Etienne Bousser, Thomas Schmitt, Nabil Tarfa, Fadila Khelfaoui, Réjean René, Jolanta-Ewa Klemberg-Sapieha, Myriam Brochu. Thermal stability of a Stellite/steel hardfacing interface during long-term aging. *Materials Characterization*. Volume 154, August 2019, Pages 181-192
4. – Linchun Wang, D.Y. Li. Effects of yttrium on microstructure, mechanical properties and high-temperature wear behavior of cast Stellite 6 alloy. *Wear*. Volume 255, Issues 1–6, August–September 2003, Pages 535-544
5. – Кожин М.В., Кусков В.Н., Галинский А.А., Копысов Г.А. Применение спеченной ленты ЛС-09X31H8AM2 в качестве антифрикционного материала подшипников насосов атомных реакторов и судовых установок. Нефтезаговый терминал выпуск 8: сборник научных статей Международной научно-технической конференции «Транспорт и хранение углеводородного сырья»; Тюмень. ТюмГНГУ. – 2015., - С. 108-113

Исследование технологических свойств и микроструктуры порошков псевдо- α и псевдо- β титановых сплавов

С.Д. Другачук¹, Ю.Ю. Малинкина¹, к.т.н., И.М. Хачатурян¹

¹ НИИЦ «Курчатовский институт» — «ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

Порошковые материалы, даже одинакового химического состава, могут значительно различаться по своим физико-химическим свойствам (гранулометрический состав, форма частиц, упруго-пластические свойства), которые формируются на стадии производства [1,2]. Именно эти свойства порошков определяют свойства конечных изделий, поэтому на начальных этапах производства уделяется тщательное внимание подбору материала.

Целью настоящей работы являлось исследование технологических свойств и микроструктуры титановых порошков псевдо- α и псевдо- β сплавов, для дальнейшего производства изделий из них методом горячего изостатического прессования (ГИП).

Выявлено, что оптимальным для получения порошков титановых сплавов считают метод вращающейся заготовки (PREP), обеспечивающий наибольшую чистоту порошков и их однородность по гранулометрическому составу. Гранулы, полученные методом центробежного распыления заготовок, имеют меньшую плотность утряски по сравнению с гранулами, полученными методом газовой атомизации, и требуют меньше затрат при засыпке и уплотнении гранул в капсулы [3]. Также, при центробежном распылении заготовок в гранулах наблюдается практически полное отсутствие газовой пористости.

В работе проведены исследования порошковых материалов, полученных из различных классов титановых сплавов (псевдо- α , псевдо- β). Рассмотрены следующие характеристики порошков: гранулометрический состав, текучесть, химический состав, микроструктура и микротвердость, сферичность и наличие сателлитов.

По результатам проведенных исследований порошкового материала из титановых псевдо- α и псевдо- β сплавов методом PREP, установлено, что они имеют высокое качество.

Таким образом, данные исследования подтверждают возможность использования в дальнейшей работе полученных порошковых материалов при изготовлении опытных образцов и деталей методом ГИП, что представлено исследованиями механических свойств опытных образцов из данных титановых сплавов.

1. Гиршов В.Л., Котов С.А., Цеменко В.Н. Современные технологии в порошковой металлургии: учеб. пособие / - СПб.: Изд-во Политехн. Ун-та, 2010.- 385 с.
2. Александров А.А., Александров А.В., Демченков Г.Г., Кузнецов С.Ю., Осипов С.А. Использование металлургии гранул титановых сплавов для получения новых материалов и изделий с повышенными характеристиками // Титан, 2017, №1, с.28-33.
3. Востриков А.В., Сухов Д.И. Производство гранул методом PREP для аддитивных технологий – текущий статус и перспективы развития // Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн. 2016. №8 (44). Ст. 03.

Исследование влияния ионизирующего излучения на структуру фуллеренов C₆₀

М.А. Маркова¹, Ж.Б. Лютова^{1,2}

¹Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина

Химические и физические особенности фуллеренов и их аддуктов создают широкий спектр возможностей для их успешного применения во многих областях жизнедеятельности человека. Благодаря своей лиофильности, электронодефицитности и способности реагировать с образованием синглетного кислорода, фуллерены являются перспективными активными веществами для наномедицины и косметологии. Так в настоящее время особо актуальна возможность применения фуллерена C₆₀ в качестве противовирусного средства [1]. Для данных применений фуллеренов крайне важна их потенциальная токсичность, которую авторы работы [2] связывают с включением молекул органического растворителя в кристаллическую структуру фуллерена.

В комнатных условиях C₆₀ представляет собой фуллерит с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой, в которой молекулы вращаются. Известно, что на рентгенограммах ГЦК-фуллерита C₆₀ наблюдаются искажения в виде малоуглового “плеча” линии (111), появления сложного профиля линии (311), а также уширения линий, объясняющиеся наличием нестабильной (относительно ГЦК) гексагональной плотной ГПУ-фазы, существующей в виде двухслойных включений в качестве ошибок упаковки в трехслойной ГЦК структуре [3]. Органический растворитель в структуре фуллерита C₆₀ может присутствовать в некотором количестве “запаянным” в междоузлиях кристаллическом пространстве ГПУ фазы. Оценить присутствие некоторого количества ГПУ фазы не представляется возможным из-за совпадения положений основных пиков обеих фаз. Для оценки радиационной стойкости фуллерита C₆₀ было проведено облучение гамма-излучением изотопа Co-60 стерилизующими дозами до 25кГр. На рентгенограммах облученного C₆₀ наблюдается уменьшение плеча при линии 111 и увеличение интенсивности всех линий при более узкой полуширине пиков.

Проведенное исследование дает информацию не только о радиационной стойкости фуллерена C₆₀, важнейшей характеристике вещества, применение которого в качестве фармпрепарата может предполагать радиационную стерилизацию как финишный этап технологии производства, но и демонстрирует упорядочение структуры фуллерита C₆₀ за счет уменьшения количества примеси ГПУ-фазы, что влечет уменьшение остаточного количества органического растворителя в образце.

1. Piotrovsky L. B., Kiselev O. I. Fullerenes and Viruses // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. - 2004. - №12. - С. 397–403.
2. Zhu S., Oberdörster E., L.Haasch M. Toxicity of an engineered nanoparticle (fullerene, C₆₀) in two aquatic species, Daphnia and fathead minnow // Marine Environmental Research. - 2006. - №62. - С. S5-S9.
3. Королев Ю.М., Козлов В.В., Поликарпов В.М., Антипов Е.М. Особенность рентгенографического фазового состава фуллерена C₆₀ // Высокомолекулярные соединения. – 2001, сер.А, т.43, №11. - С. 1933-1940.

Электрохимические методы исследования новых электрокатализаторов топливных элементов с твердым полимерным электролитом
**Р.М. Меншарпов¹, Н.А. Иванова¹, Д.Д. Спасов^{1,2}, А.А. Засыпкина¹, М.В. Синяков^{1,3},
Е.А. Серегина¹, В.Н. Фатеев¹**

¹НИИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

²Национальный исследовательский университет "МЭИ", г. Москва

³РХТУ им. Д. И. Менделеева, г. Москва

Особое место в водородной энергетике занимают топливные элементы с твердым полимерным электролитом (ТЭ с ТПЭ). Ключевым компонентом ТЭ с ТПЭ является электрокатализатор. При разработке ТЭ с ТПЭ обычно применяют платиновые электрокатализаторы на углеродном носителе (саже). Однако при эксплуатации данные электрокатализаторы подвержены деградации. Ухудшение эффективности электрокатализатора в основном связано с агрегацией платиновых наночастиц, их растворением, миграцией, отрывом от углеродного носителя и коррозией носителя. Также при работе ТЭ с ТПЭ в широком диапазоне внешних условий важной задачей является стабилизация водного баланса. Для обеспечения эффективной работы электрокатализаторов применяют более устойчивые к коррозии носители (углеродные нанотрубки, восстановленный оксид графена и т.д.) [1], либо включают в состав дополнительные соединения, в частности SnO₂ и SiO₂, стабилизирующие влажосодержание в каталитическом слое и препятствующие деградации платиновых наночастиц [2,3].

В данной работе будет рассмотрен широкий спектр электрохимических исследований для оптимизации состава и метода синтеза модифицированных электрокатализаторов. Исследование электрокатализатора, как правило, начинается с оценки его электрохимической активной поверхности (ЭАП) в трехэлектродной ячейке с использованием метода циклической вольтамперометрии (ЦВА). Для оценки устойчивости электрокатализатора к деградации носителя и наночастиц платины применяют методику ускоренного стресс-тестирования. При использовании электрокатализатора в составе катодного каталитического слоя исследуют его активность в реакции восстановления кислорода методом вращающегося дискового электрода. Дальнейшее исследование электрокатализаторов проводится в составе лабораторной ячейки ТЭ. Применяют методики вольтамперометрии в потенциодинамическом и потенциостатическом режимах. Для характеристики ЭАП электрокатализатора в составе каталитического слоя используют методику регистрации ЦВА в ячейке ТЭ. Также эффективным способом оценки каталитического слоя в составе ТЭ является методика импедансной спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке НИИЦ «Курчатовский институт» в рамках проекта по приказу от 18.08.2022 г. № 2174 « Прикладные работы и исследования в области обеспечения радиационной безопасности и ликвидации радиационного наследия на объектах использования атомной энергии» по теме тематического плана 6.8 «Автономный пуск батареи топливных элементов с твердым полимерным электролитом в условиях отрицательных температур окружающей среды» (Прикладные исследования 0112)

1. Du L. et al. Advanced catalyst supports for PEM fuel cell cathodes //Nano Energy. 2016. Т. 29. С. 314-322.
2. Spasov D. D. et al. On the influence of composition and structure of carbon-supported Pt-SnO₂ hetero-clusters onto their electrocatalytic activity and durability in PEMFC //Catalysts. 2019. Т. 9. №. 10. С. 803.
3. Spasov D. D. et al. Nanostructured Pt₂₀/SiO₂^x/C Electrocatalysts for Water-Balance Stabilization in a Proton Exchange Membrane Fuel Cell //Nanobiotechnology Reports. 2022. Т. 17. №. 3. С. 320-327.

Трехмерный анализ металлических наночастиц и их организации при стабилизации макромолекулами полимеров методом криогенной электронной томографии

А.А. Михуткин¹, Е.В. Ястремский^{1,2}, Ю.М. Чесноков¹, А.А. Жариков³, А.А. Зезин^{3,4}, А.С. Поздняков⁵, А.Л. Васильев^{1,2}

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

² *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва*

³ *Московский государственный университет им. Ломоносова, Химический факультет, Москва*

⁴ *Институт синтетических полимерных материалов Российской Академии наук, Москва*

⁵ *Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск*

УДК: 544.77, 620.187, 537.533.35, 537.9

Уникальные оптические, каталитические, электрофизические свойства наночастиц золота и серебра, стабилизированных макромолекулами полимеров, обуславливают неугасающий интерес к разработке и совершенствованию методов их синтеза. Поливинилимидазол (ПВИ) представляет собой нетоксичный, гидрофильный, термически и химически стойкий полимер, функциональные группы которого являются эффективными лигандами по отношению к ионам переходных металлов. Таким образом, наноконкомпозиты на основе ПВИ, содержащие наночастицы серебра и золота, могут рассматриваться как возможные компоненты для ряда медицинских приложений, в частности, разработки антибактериальных препаратов и тераностики. Стабилизированные в матрице ПВИ наночастицы золота, размеры которых не превышают нескольких нанометров, являются перспективными объектами для катализа.

Полноценную информацию о таких системах в жидкой (или вязкой) фазе можно получить только посредством восстановления её трехмерной микроструктуры при использовании криогенной электронной микроскопии [1, 2]. В представленной работе анализировалась трехмерная структурная организация наночастиц золота и серебра, стабилизированных в ПВИ, методом криоэлектронной томографии (крио-ЭТ). Крио-ЭТ исследования проводили с помощью просвечивающего электронного микроскопа Titan Krios 60-300 TEM/STEM (Thermo Fisher Scientific, США). Был разработан алгоритм многоэтапной обработки и реконструкции, включающий томографическую реконструкцию при помощи программного обеспечения (ПО) IMOD, коррекцию «отсутствующего клина» («missing-wedge») при помощи модели IsoNet [3], обработку трехмерного стека, визуализацию и комплексный количественный анализ с применением ПО Avizo (Thermo Fisher Scientific, США). По результатам обработки данных построены 3D-модели исследуемых систем и проведен подробный количественный трехмерный анализ структуры образцов, включающий анализ наночастиц и их кластеров и их пространственного распределения. Это позволило получить полное трехмерное представление о структуре исследуемых систем в нативном состоянии и численно их охарактеризовать.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

1. N.M. Kuznetsov, S.I. Belousov, A.V. Bakirov et al. Unique rheological behavior of detonation nanodiamond hydrosols: The nature of sol-gel transition // Carbon. 2020. Vol. 161. P. 486-494.
2. А.А. Михуткин, Р.А. Камышинский, Н.М. Кузнецов и др. Исследование 3D-структуры гидрогеля с наночастицами золота методом криогенной электронной микроскопии // Российские Нанотехнологии. 2022. Т. 17. № 3. С. 394–399.
3. Y.-T. Liu, H. Zhang, H. Wang et al. Isotropic reconstruction of electron tomograms with deep learning // bioRxiv. 2021. <https://doi.org/10.1101/2021.07.17.452128>

Влияние Ga на термодинамическую стабильность ферромагнитной фазы в системе Mn-Al

Т.А. Морозова¹, М.В. Горшенков¹, А.С. Фортуна¹

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

В настоящей момент постоянные магниты широко применяются в энергетических, транспортных и электронных системах. Для получения постоянных магнитов активно используют ферриты и материалы на основе редкоземельных элементов (РЗЭ). Ферриты характеризуются невысокими магнитными свойствами, но довольно дешевы в производстве. Материалы на основе РЗЭ, наоборот, имеют высокие магнитные характеристики и высокую стоимость как компонентов сплавов, так и их изготовления. Высокая цена РЗЭ и недостаточно высокие магнитные свойства ферритов ограничивают их широкое применение в промышленности. В связи с этим марганцевые сплавы, такие как MnAl, MnGa и MnBi, представляют интерес, как относительно дешевые постоянные магниты, не содержащие РЗЭ, обладающие высоким теоретическим уровнем свойств. Сплавы MnAl обладают высокой константой магнитокристаллической анизотропии, а также теоретически возможным магнитным произведением около 100 КДж/м³ [1]. Однако к настоящему моменту экспериментально не удалось приблизиться к высокому уровню магнитных свойств. Наилучшие магнитные характеристики сплавов получаются в процессе термомеханической обработки, однако, ферромагнитная τ -фаза является метастабильной и в процессе обработки частично распадается на равновесные фазы γ_2 и β (Mn), что ухудшает магнитные характеристики [1]. Таким образом, повышение термодинамической стабильности τ -фазы является крайне актуальной задачей, которую можно решать путем легирования. Система MnGa также содержит ферромагнитную τ -фазу со структурным типом L1₀, имеющую близкие параметры решётки. Однако, в отличие от системы MnAl, τ -фаза в Mn-Ga является термодинамически стабильной. В связи с высокой стоимостью галлия привлекательной является тройная система MnAlGa. В работе исследовалось влияния Ga на фазовые превращения и термодинамическую стабильность сплава Mn₅₅Al₃₆Ga₉. Методом электродуговой плавки был получен сплав состава Mn₅₅Al₃₆Ga₉. После гомогенизирующего отжига и охлаждения с контролируемой скоростью в сплаве наблюдалось образование τ - и γ_2 -фаз различного состава. Анализ сплавов проводился с использованием рентгеноструктурного анализа, дифференциальной сканирующей калориметрии и растровой электронной микроскопии (РЭМ). Температура Кюри была определена по термомагнитным кривым, полученных с использованием вибромагнетометра. После термообработок в тройном сплаве были сформированы две изоморфные τ -фазы (температура Кюри: T_{c1}=314 °С, T_{c2}=365 °С, соответственно). Первая магнитная τ -фаза (L1₀(ϵ)) образуется из высокотемпературной ϵ -фазы, вторая L1₀(γ_2) в ходе дополнительного отжига из равновесной γ_2 -фазы. Изучение термодинамической стабильности ферромагнитных фаз в течение отжига при 700 °С показало, что тройной сплав (Mn₅₅Al₃₆Ga₉) обладает повышенной термической стабильностью по сравнению с бинарным сплавом Mn-Al и тройной системой Mn-Al-C[2]. Начало процесса распада τ -фазы на равновесные происходит после 4 часов отжига. После 16 часов отжига температура Кюри фазы L1₀(ϵ) резко уменьшается. Скорее всего, это связано с распадом τ -фазы и резким увеличением содержанием γ_2 . После отжига в течение 32 часов в тройном сплаве по-прежнему присутствуют две температуры Кюри, которые соответствуют фазам L1₀(ϵ) и L1₀(γ_2) (347 °С и 329 °С). После 128 часов отжига в образце осталось 83% τ -фазы. Состав двух τ -фаз выравнивается с увеличением продолжительности времени отжига.

1. Coey J.M.D. Permanent magnets: Plugging the gap // Scripta Materialia. – 2012. – V. 67 – P. 524-529.

2. Dreizler W.H., Mentz A. Transformation kinetics of the ferromagnetic alloy Mn-Al-C // IEEE Transactions on Magnetism, 1980. Vol. 16, № 3. P. 534-536.

Исследование микроструктуры Gd – содержащих сталей

А.А. Павельева¹

¹Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова, Гатчина

УДК: 539.25, 539.26, 539, 219

В настоящей работе рассматривается разработка аустенитных сплавов для контроля ядерной критичности при хранении отработавшего ядерного топлива. В этом исследовании физическая и сварочная металлургия аустенитных сплавов, обогащенных Gd, были исследованы с помощью дифференциального термического анализа и некоторых других методов определения микроструктурных характеристик.

Методом вакуумного индукционного нагрева были выплавлены шесть сплавов нержавеющей стали с различным содержанием Gd. Слитки имели площадь 100 мм и длину 75 см. Не содержащая Gd нержавеющая сталь 316L была приготовлена в качестве основы для сравнения. Остальные обогащенные Gd сплавы идентифицированы в соответствии с их целевыми номинальными концентрациями Gd (0,4; 1; 2; 4 и 6 мас.% Gd). Номинальные составы были выбраны для получения матричного состава типа 316L, который, как ожидалось, будет затвердевать в режиме первичного феррита.

Результаты исследований показали, что эти сплавы образуют богатую никелем интерметаллическую фазу $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$, которая обедняет матрицу никелем и обогащает матрицу хромом, молибденом и марганцем. Таким образом, для получения матричного состава, аналогичного составу 316L, требуется корректировка номинальных концентраций Ni, Cr, Mo и Mn, чтобы компенсировать эти эффекты обогащения и обеднения сплава.

Исследуемые микроструктуры содержали четыре фазы: аустенитную матрицу, дельта-феррит, сигма-фазу и интерметаллическую фазу $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$. Концентрация фазы интерметаллида $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$ увеличивалась с увеличением концентрации Gd. Дельта-феррит появляется в двух местах по всей микроструктуре — в ядрах ячеек и в междендритных областях. Часто имелась очень тонкая фаза, богатая Gd, примыкающая к основной фазе $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$ в междендритной области. Эта Gd-содержащая область, как правило, окружала междендритный дельта-феррит. Дельта-феррит обогащен Cr и Mo и обеднен Ni по сравнению с аустенитной матрицей. Такое поведение сегрегации наблюдалось между ферритом и аустенитом в нержавеющих сталях. Cr и Mo имеют идентичную кристаллическую структуру (ОЦК) и, таким образом, демонстрируют более высокую растворимость в дельта-феррите. В то время, как Ni и аустенитная матрица имеют ГЦК структуру, и Ni, предпочтительно, растворяется в аустените. В одном из случаев тонкая фаза, богатая Gd, присутствовала по обе стороны от более крупной фазы $(\text{Fe, Ni, Cr})_3\text{Gd}$, так же, как и феррит присутствовал с каждой стороны. Однако, когда тонкая богатая Gd фаза отсутствовала на одной стороне более крупной фазы $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$, феррит, так же не наблюдался и на этой стороне. Стоит отметить, что затвердевание этих сплавов происходит в режиме первичного феррита и завершается перитектической реакцией с участием фазы $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$. Феррит частично превращается в аустенит после затвердевания путем твердотельного преобразования с получением конечной микроструктуры, которая имеет аустенитную матрицу с остаточным ферритом в ядрах дендритов и междендритным $(\text{Fe,Ni,Cr})_3\text{Gd}$ фазами.

1. DuPont J. N.. Physical and Welding Metallurgy of Gd-Enriched Austenitic Alloys for Spent Nuclear Fuel Applications-Part I: Stainless Steel Alloys // Welding Journal. 2014.Т. 83. – №. 11. С. 289-S.
2. Handbook M. //Binary alloy phase diagrams. Materials Park, Ohio: ASM International. 1992. Vol. 3.

Исследование углеродных мембран ядерными методами

М.В. Ремизов, В.Т. Лебедев, В.С. Козлов

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

УДК 539.1.06

В настоящее время экологические проблемы в странах с развитой промышленностью создают тренд на переход к «зеленой» энергетике [1]. Одним из альтернативных источников энергии может быть водород. Переход к водородной экономике во многом опирается на экологически безопасные энергетические устройства, использующие различные типы топливных элементов (ТЭ). Одним из основных направлений в технике ТЭ является создание низкотемпературных твердополимерных топливных элементов на основе перфторированных мембранных материалов (ТЭ с протонообменной мембраной). В настоящее время синтезировано множество полимерных мембранообразующих материалов, но наиболее перспективными соединениями являются перфторированные сополимеры [2]. Они обладают необходимыми химическими и механическими свойствами, обеспечивающими высокую ионную проводимость мембран, отличные механические характеристики, устойчивость к окислению при повышенных температурах и стабильную работу ТЭ на основе мембран в течение десятков тысяч часов. Интерес к перфторированным протонообменным мембранам обусловлен их уникальными химическими, термическими и механическими свойствами, а также структурными особенностями. Благодаря наличию ионогенных сульфокислотных групп на концах боковых цепей фторуглеродного остова мембранообразующих сополимеров эти мембраны имеют гидрофобно-гидрофильную структуру и содержат протонпроводящие домены.

Для исследования структуры ТЭ были синтезированы мембраны двух типов мембран: акваион и нафион. Водород в них был заменен на железо, для чего образцы были предварительно обработаны кипячением в дистиллированной воде (30 мин.) с последующим удалением воды с поверхности с помощью фильтровальной бумаги и хранились в стеклянной посуде с притертыми пробками. После обработки образцы замачивали в 0.2 М растворе FeCl₃ на 1 час, затем сушили в вакууме три дня при комнатной температуре. Достигнута степень нейтрализации 99 %. Структура вокруг железа была изучена с помощью мессбауэровской спектроскопии [3], а содержание железа – с помощью рентген-флуоресцентного анализа. Работа выполнена благодаря гранту 18-29-19008

1. European Commission. Eur 20719 EN—Hydrogen Energy and Fuel Cells—A Vision of Our Future. Luxemburg: Office for Official Publications of the European Committees; 2003.
2. Primachenko, Oleg N.; Marinenko, Elena A.; Odinkov, Alexey S.; Kononova, Svetlana V.; Kulvelis, Yuri V.; Lebedev, Vasily T. (2020). State of the art and prospects in the development of proton-conducting perfluorinated membranes with short side chains: A review. *Polymers for Advanced Technologies*, (), pat.5191
3. H. K. Pan, D. J. Yarusso, G. S. Knapp, M. Pineri, A. Meagher, J. M. D. Coey, S. L. Cooper. EXAFS and Mossbauer studies of iron neutralized Nafion Ionomers. *J. Chem. Phys.* 1983. V. **79**. No 10. P.4736-4745.

Влияние нейтронного излучения на детектор полупроводникового спектрометра и способы его экранирования

П.В. Семенухин, М.В. Ремизов

ГНЦ РФ ЦНИИ РТК, Санкт-Петербург

УДК 539.1.06

При воздействии мощного радиационного поля на приборы, регистрирующие ионизирующее излучение, в последних образуются дефекты, влияющие на их работоспособность. Не обладающая радиационной стойкостью аппаратура может отказаться после воздействия даже таких относительно небольших доз облучения, как

10 Гр в космическом пространстве или под действием флюенса нейтронов 1011 нейтр./см² вблизи ядерного реактора [1].

В ходе исследования влияния нейтронного излучения на детектор полупроводникового спектрометра были рассмотрены следующие вопросы:

- оценка стойкости к нейтронному излучению собственно материала ОЧГ детектора разного типа;

- оценка степени влияния спектра и интенсивности потока нейтронного излучения на деградацию детекторов из ОЧГ [2];

- подбор влияющих на нейтронное излучение фильтров и экранов, уменьшающих воздействие нейтронного излучения на материал ОЧГ детектора [3];

- оценка влияния активационных особенностей, применяемых защитных и конструкционных материалов, на фоновые характеристики гамма-спектрометра;

- определение методических приемов восстановления германиевых детекторов после воздействия нейтронного излучения;

В результате проведенных исследований был выявлен оптимальный детектор, способный работать в условиях высокого нейтронного поля (Р-тип – снаружи, N-тип – внутри).

Была оценена степень влияния спектра и интенсивности нейтронного излучения на материал детектора. Для защиты электронной части были проработаны различные способы построения защитного кожуха с толщиной карбида бора и полиэтилена. Установлены основные типы структурных и изотопных дефектов, образующиеся в материале детектора и предложены способы их устранения.

Результаты получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России FNRG 2022 0018 1021063012570-0-1.3.4 № 075-01623-22-00 «Исследование методов повышения стойкости к нейтронному излучению гамма-спектрометров высокого разрешения на основе кристаллов из особо чистого германия».

Библиографические ссылки

1. Горн Л. С, Хазанов Б. И. Современные приборы для измерения ионизирующих излучений. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 232 с.
2. Вологдин Э.Н., Лысенко А.П. Интегральные радиационные изменения параметров полупроводниковых материалов / Учебное пособие по дисциплине: «Радиационная стойкость полупроводниковых приборов и радиоэлектронных устройств», Российская академия наук, Центр «Интеграция», Московский государственный институт электроники и математики, Москва 1998 г., с.85
3. P. De Bievre and P.D. P. Taylor, IUPAC Recommended Isotopic Abundances. Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 123, 149 (1993).

Подбор параметров электродугового испарения лютеций-содержащих графитовых электродов с целью получения эндометаллофуллеренов лютеция

*А.А.Сергеев^{1,2}, А.В.Титова^{1,2}, В.П.Седов², Д.Н.Орлова²,
А.А.Борисенкова^{1,2}, Ж.Б.Лютова^{1,2}, М.А.Маркова², М.В.Суясова^{1,3}*

¹Курчатовский институт – ПИЯФ, Гатчина

²СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

³СПбГУ ГПС МЧС России МЧС России, Санкт-Петербург

УДК: 547-30

Благодаря своим уникальным свойствам фуллерен является перспективным объектом для внедрения в химическую и фармацевтическую промышленность [1]. Так, эндометаллофуллерены (фуллерены с атомами металла внутри углеродного каркаса) могут быть использованы при разработке новых эффективных контрастных материалов для томографических методов диагностики, а также при получении радиоактивных меток и радиофармпрепаратов (радиоактивных изотопов), путём активации ядер тяжёлых атомов внутри фуллеренового каркаса, облучённых нейтронами или протонами [2].

Приоритетным объектом исследования является эндо-комплекс фуллерена с изотопом лютеция. Лютеций-177 показал положительную динамику в терапии нейроэндокринных опухолей, а также рака предстательной железы [3].

Целью нашей работы является поиск оптимальных параметров метода электродугового получения эндометаллофуллерена лютеция.

В данном исследовании для изготовления электродов использовались два типа смеси: оксид лютеция (Lu_2O_3) с порошкообразным графитом и пиролизат фталоцианина лютеция (LuC_{32}), лютеций брался природного изотопного состава. Среднее содержание Lu в приготовленном электроде составило 1 ат. %. Электродуговое испарение проводилось при токах от 130 до 180 А. В результате испарения была получена фуллеренсодержащая сажа, из которой N, N-диметилформамидом (ДМФА), с добавкой 0,1 % гидразин-гидрата (ГГ) был получен экстракт [4]. Полученный экстракт был проанализирован методами ИК- и масс-спектроскопии. Было выяснено, что максимальной производительности по целевому продукту (эндометаллофуллерену лютеция) можно добиться при испарении электрода, заполненного Lu_2O_3 и порошкообразным графитом при токах от 130 до 140 А. Полученные результаты обсуждаются.

1. Пат. 2630561 РФ, МПК С01В 32/156, В82В 3/00, В82У 40/00. Способ получения водно-солевых дисперсий фуллерена / Пургина Д. Д., Андреев С. М., Шершакова Н. Н., Барабошкина Е. Н., Хаитов М. Р ; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение "Государственный научный центр "Институт иммунологии" Федерального медико-биологического агентства России. - № 215145015 ; заявл. 20.10.2015 ; опубл.11.09.2017, Бюл. № 12;
2. Евлампиева Н. П., Лебедев В. Т., Сжогина А.А.[и др.]. Вестник СПбГУ. Физика и химия. 2018. Т. 5 (63). Вып. 2. С. 86–96.
3. Нигматович, Т. М.; Арифович, З. Д.; Бахтиёрович, Н. Д. Рак Предстательной Железы: Радионуклидная Терапия С Лютецием-177 Псма. *САJMNS* 2022, 3, 146-153.
4. Sedov V. P. et al. Deep Extraction of Fullerene-Containing Carbon Black with a Polar Solvent: Analysis of Products //Russian Journal of Applied Chemistry. – 2020. – Т. 93. – №. 4. – С. 527-539.

Оценка эффективности технологии наплавки антикоррозионного покрытия оборудования АЭУ аргонодуговым способом с пониженным тепловложением

Г.Б. Фомин, к.т.н. И.А. Морозовская, к.т.н. М.Н. Тимофеев

НИИ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург

Рассмотрена возможность применения аргонодугового процесса СМТ (Cold Metal Transfer), обеспечивающего пониженное тепловложение при наплавке антикоррозионного покрытия корпусного оборудования атомных энергетических установок с водным теплоносителем.

Особенность технологии заключается в возникновении контролируемого короткого замыкания с понижением тока, способствующего стабильности процесса с частотой ~ 60 Гц и пониженному тепловложению в зоне наплавки [1,2].

Проведено сравнение характеристик наплавленного металла, выполненного традиционно применяемыми способами и процесса СМТ.

Были выполнены двухслойные наплавки в нижнем и вертикальном положениях сварочной проволокой марок Св-07Х25Н13 для первого слоя и Св-04Х20Н10Г2Б для второго слоя в среде аргона [3].

Экспериментально определены технологические параметры наплавки, обеспечивающие наилучшее сочетание ширины и высоты при наименьшей доле участия основного металла и отсутствие дефектов.

Определён химический состав, содержание ферритной фазы, механические свойства и стойкость против МКК наплавленного металла после технологических отпусков.

Установлено, что характеристики наплавленного металла соответствуют требованиям нормативной документации, предъявляемым к металлу антикоррозионного покрытия, выполненного лентой или проволокой того же состава под флюсом [4].

Опробование технологии наплавки в промышленных условиях показало эффективность применения способа для наплавки антикоррозионного покрытия оборудования АЭУ в различных пространственных положениях, при этом с учётом малой доли участия основного металла было сделано предположение, что требуется дополнительное исследование возможности применения процесса СМТ для наплавки однослойного антикоррозионного покрытия.

1. Selvi, S., Vishvakshenan, A., Rajasekar, E. (2018)./ Cold metal transfer (CMT) technology - An overview.// Defence Technology, 14(1), 28–44.

2. Kun He, Lijin Dong, Qinying Wang (2022). Comparison on the microstructure and corrosion behavior of Inconel 625 cladding deposited by tungsten inert gas and cold metal transfer process. Surface and Coatings Technology, 435, Article 128216.

3. Г. П. Карзов, Э. И. Михалева, И. А. Морозовская /Создание сварочных материалов для антикоррозионной наплавки корпусов реакторов ВВЭР нового поколения // Радиационное материаловедение и конструкционная прочность реакторных материалов/Под. Общ. Ред. акад. РАН И. В. Горынина .- СПб.:ФГУП ЦНИИ КМ «Прометей»,2002.-26-37с.

4. М. Н. Тимофеев, И. А. Морозовская, С. Н. Галяткин, Н.И. Затоковенко / Исследование коррозионно-стойких наплавки оборудования АЭУ, выполненных ленточным электродом дуговым и электрошлаковым способами // Вопросы материаловедения № 105, 2021- с.94-106.

Алмазные наночастицы с поверхностью, модифицированной ионами кобальта

А.С. Чижикова, Е.Б. Юдина

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

УДК: 544.77.032.13, 544.77.054.6, 54.057

Большой интерес материаловедов вызывают алмазные наночастицы, получаемые методом детонационного синтеза – детонационные наноалмазы (ДНА). Важной особенностью частиц ДНА является присутствие на поверхности наночастиц функциональных групп, что позволяет химически связывать с ними ионы металлов [1-3]. Область применения таких частиц охватывает различные области – катализ, медицина, гальванотехника и т.п. Применение кобальта для такой модификации представляет особый интерес в качестве магнитных наножидкостей. [4].

Задачей данного исследования являлось получение устойчивых суспензий детонационного наноалмаза с поверхностью, модифицированной ионами кобальта.

Для синтеза применяли гидрозоль деагломерированного ДНА и соли кобальта – $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (**Образец 1**); $\text{Co}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (**Образец 2**). Модификацию поверхности алмазных частиц осуществляли взаимодействием гидрозоля ДНА с водными растворами солей кобальта с применением ультразвуковой обработки и последующей декантацией.

Методами кондуктометрического титрования и лазерного доплеровского электрофореза определено количество связанных ионов кобальта с максимально возможным количеством карбоксилат-ионов (COO^-). Содержание металлов в порошке найдено рентгено-энергодисперсионным анализом и составляет 0,26-0,30 вес.% и 1,00-1,17 вес.% в **Образце 1** и **Образце 2**, соответственно.

Методом динамического рассеяния света выявлены характерные размеры агрегатов в суспензии, образуемых при ионном обмене протонов карбоксилатных групп на поверхности ДНА и ионов кобальта. Концентрация полученных суспензий составляла 0,5 вес.%.

Седиментационная устойчивость суспензий определяется значением электрокинетического потенциала, который составляет $-43,8 \pm 0,1$ мВ и $-29,2 \pm 0,8$ мВ для **Образца 1** и **Образца 2**, соответственно.

Таким образом, показана возможность получения стабильных суспензий ДНА с поверхностью, модифицированной ионами кобальта. Количество ионов кобальта на одну частицу ДНА составляет 4-5 и 16-19 при использовании нитрата и ацетата кобальта, соответственно.

Исследования методом энергодисперсионного рентгеновского анализа выполнены на оборудовании Инжинирингового центра Санкт-Петербургского государственного технологического института (Технического университета).

1. Алексенский А. Е. и др.. Интеркалирование ультрадисперсного алмаза в водных суспензиях // Физика твердого тела. 2004. № 4 (46). С. 668–669.
2. Panich A. M. et al. Gd(III)-Grafted Detonation Nanodiamonds for MRI Contrast Enhancement // The Journal of Physical Chemistry C. 2019. № 4 (123). P. 2627–2631.
3. Yudina E. B. et al. Interaction of Carboxyl Groups with Rare Metal Ions on the Surface of Detonation Nanodiamonds // European Journal of Inorganic Chemistry. 2019. № 39–40 (2019). P. 4345–4349.
4. Sundar L. S. et al. Thermal conductivity and viscosity of hybrid nanofluids prepared with magnetic nanodiamond-cobalt oxide (ND- Co_3O_4) nanocomposite // Case Studies in Thermal Engineering. 2016. (7). P. 66–77.

Синтез магнитовосприимчивой целлюлозы

С.А.Шмелькова^{1,2}, В.П. Седов², Д.Н. Орлова², М.В. Суясова^{1,3}

¹Курчатовский институт – ПИЯФ, Гатчина

²СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

³СПбГУ ГПС МЧС России МЧС России, Санкт-Петербург

УДК: 661.728

Целлюлоза – наиболее распространенный биополимер в природе. В последнее время большое внимание уделяется нанокompозитам целлюлозы, благодаря их уникальной структуре как наиболее распространенного природного полимера, обладающего исключительными свойствами, такими как возобновляемость, биоразлагаемость и высокая удельная прочность на растяжение, соотношение сторон и модуль Юнга. Известная целлюлоза естественным образом присутствует в растительной лигноцеллюлозной биомассе в виде биокompозита, изготовленного из целлюлозы, гемицеллюлозы, лигнина и т.д. Кроме того, она может быть извлечена из других природных источников, включая бактерии, водоросли и морских животных [1].

Одним из перспективных объектов исследования является магнитовосприимчивая целлюлоза. Модификация целлюлозных волокон магнитными частицами предлагает ряд преимуществ, которые варьируются от возможности манипулирования ориентацией и флокуляцией взвешенных волокон до их использования в производстве из магнитной бумаги для целей кодирования и хранения, многократной печати и магнитной защиты [2]. Такую целлюлозу можно получить методом загрузки просвета с использованием отбеленной микрокристаллической целлюлозы и наночастиц феррита кобальта (CoFe₂O₄) [2].

Целью нашей работы является создание магнитовосприимчивой целлюлозы, полученной с использованием разных магнитных соединений, таких как феррит кобальта, неодим железа и эндометаллофуллерен железа.

В данном исследовании магнитные волокна были получены методом загрузки просвета. Полученные образцы были проанализированы методом ИК-спектromетрии. В качестве эталонного образца использовался образец микрокристаллической целлюлозы с ферритом кобальта. Результаты экспериментов по идентификации образца с целлюлозой и эндометаллофуллереном железа обсуждаются.

1. Mehran Alavi Modifications of microcrystalline cellulose (MCC), nanofibrillated cellulose (NFC), and nanocrystalline cellulose (NCC) for antimicrobial and wound healing applications / Mehran Alavi // e-Polymers. – 2019. – С.1-7.
2. Sánchez J. Rheological behavior of magnetic pulp fiber suspensions / Sánchez J., Quintana G., Herrera A. // Tappi Journal. – 2021. – Т. 20. - №6. – С. 393-403.