



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

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



15 – 17 ноября
Open Science



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

X Всероссийского молодежного научного форума
с международным участием
«Open Science 2023»

15–17 ноября 2023 г.
Гатчина



В данном выпуске представлены аннотации докладов X Всероссийского молодежного научного форума с международным участием “Open Science 2023”, 15–17 ноября 2023 года, 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).

Спонсорами форума стали АО “Невский Проект”, Группа компаний “Соль” и ООО “РАОТЕХ”.

Сборник подготовили: И.С. Рябоконь, Л.Г. Ваганян, С.С. Мохова, В.В. Абрамец.

Обложка: Е.В. Калоева.

Примечание: материалы представлены в авторской редакции.

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели программного комитета:

Дьякова Юлия Алексеевна, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
Саранцева Светлана Владимировна, д.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Максимов Владимир Исаакович, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Секретарь программного комитета:

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

Члены программного комитета:

Аристов Дмитрий Николаевич, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Артамонов Станислав Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Воробьев Сергей Иванович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Воронин Владимир Владимирович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Григорьев Сергей Валентинович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Губанова Надежда Николаевна, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт»
Ким Виктор Тимофеевич, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Кульминская Анна Алексеевна, к.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Курбаков Александр Иванович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Лапина Ирина Михайловна, к.х.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Матвеев Максим Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Суюсова Марина Вадимовна, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Титов Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Черненко Андрей Юрьевич, к.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Шабалин Константин Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Федин Олег Львович, д.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Якорев Олег Петрович, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Демин Вячеслав Александрович, к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
Москалева Елизавета Юрьевна, д.б.н., НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
Фукс Михаил Дмитриевич, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)
Морозов Анатолий Михайлович, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)
Саргсян Артем Самвелович, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)
Савелов Александр Сегеевич, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)
Кузнецов Павел Алексеевич, д.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели организационного комитета:

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

Заместители председателей организационного комитета:

Абрамец Владислава Владимировна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Ниязов Рамиль Асхатович, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Секретарь организационного комитета:

Андреева Алина Николаевна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Члены организационного комитета:

Ваганян Лилит Гайковна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Клюшников Георгий Николаевич, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Миндалев Павел Юрьевич, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Мохова София Сергеевна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Калоева Екатерина Витальевна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Ковальская Яна Игоревна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Новосельцев Дмитрий Сергеевич, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Павельева Александра Андреевна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Рябокоть Ирина Сергеевна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Скорородова Анастасия Михайловна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Хайбулина Елизавета Сергеевна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Буш Наталия Константиновна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Жеронкина Римма Александровна, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

СОДЕРЖАНИЕ

Пленарные доклады-----	5
Направление I. Физика атомного ядра и частиц-----	9
Направление II. Теоретическая физика-----	30
Направление III. Физика конденсированного состояния-----	56
Направление IV. Физика и техника реакторов и ускорителей-----	68
Направление V. Биофизика, биомедицина, генетика-----	82
Направление VI. Материаловедение и наноструктурированные материалы-----	162
Направление VII. Ядерная медицина-----	210

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ



NICA – вселенная в лаборатории. Сверхпроводимость на службе ускорителей заряженных частиц**М.М. Шандов^{1,2}**

E-mail: shandov@jinr.ru

¹Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия²ФГБОУ ВО «Университет «Дубна», Дубна, Россия

NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility) – новый ускорительно-накопительный комплекс, сооружаемый в Лаборатории Физики Высоких Энергий Объединённого института ядерных исследований (ЛФВЭ ОИЯИ) для изучения свойств барионной материи высокой плотности. Ускорительный комплекс [1-3] включает различные источники ионов, два линейных ускорителя, новый сверхпроводящий (СП) бустерный синхротрон с магнитной жесткостью до 25 Тл*м, действующую базовую установку ЛФВЭ – СП синхротрон Нуклотрон с магнитной жесткостью до 38,5 Тл*м, новый СП коллайдер, состоящий из двух накопительных колец длиной 503 м каждое, с магнитной жесткостью до 45 Тл*м и каналы транспортировки пучков. Комплекс будет обеспечивать пучками заряженных частиц экспериментальные установки для выполнения исследований в различных областях: релятивистская ядерная физика в столкновениях тяжёлых ядер, физика спина частиц, радиобиология, прикладные исследования и др. [1, 4-6].

Сборка инжекционной цепочки тяжёлых ионов (вплоть до $^{197}\text{Au}^{31+}$ и $^{209}\text{Bi}^{35+}$) в Нуклотрон, включающей источник тяжёлых многозарядных ионов типа КРИОН, линейный ускоритель тяжёлых ионов, Бустер, станцию обдирки и каналы транспортировки пучков, завершена в 2020 г., а в декабре проведен первый сеанс пусконаладочных работ (ПНР) с пучком. В настоящее время завершено четыре сеанса ПНР с различными пучками ионов, два из которых сопровождалось проведением экспериментов на установках BM@N (Baryonic Matter at Nuclotron) и SRC (Short Range Correlation). Тем самым, завершился первый этап сооружения ускорительного комплекса NICA.

В рамках выполнения второго этапа проекта NICA идёт монтаж оборудования колец коллайдера и готовятся эксперименты с детектором MPD (Multi-Purpose Detector) на встречных пучках при светимости до $10^{27} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ в столкновениях тяжёлых ядер при энергиях $\sqrt{s}=4\div 11 \text{ ГэВ/нуклон}$ [5]. При реализации третьего этапа – планируется сооружение SPD детектора (Spin Polarized Detector) и проведение исследований в области физики спина в столкновениях $\uparrow p(\uparrow d)$ со светимостью до $10^{32} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ при энергиях $\sqrt{s}=27(13.5) \text{ ГэВ/нуклон}$ [6].

Несмотря на всю перспективность применения, с момента открытия феномена сверхпроводимости Х. Камерлинг-Оннесом в н. XX в. прошло почти 50 лет до первого экспериментального подтверждения возможности создания устройства на основе сверхпроводника [7]. За это время учёными всего мира было экспериментально открыто множество необычных свойств сверхпроводников (идеальный диамагнетизм, сверхпроводники 2-го рода и т.п.), а также разработано множество теоретических моделей, от объясняющих отдельные эффекты, до феноменологической теории и механизмов низко- и высокотемпературной сверхпроводимости.

Одной из первых областей, где сверхпроводники нашли своё применение, стали ускорители заряженных частиц высоких энергий. ЛФВЭ ОИЯИ одной из первых в мире начала разработку СП магнитов для ускорителей. Результатами этих работ стало создание конструкции СП кабеля типа «Нуклотрон» [8], на базе которого созданы магниты всех кольцевых ускорителей комплекса NICA. Данная конструкция нашла применение и в магнитных системах других ускорителей [8]. В настоящее время в ЛФВЭ продолжается активная научная и экспериментальная работа, как по улучшению характеристик уже разработанных конструкций и технологий, так и по иным перспективным направлениям в области сверхпроводников (применение высокотемпературных сверхпроводников, улучшение их характеристик и т.д.).

1. Технический проект ускорительного комплекса NICA // под ред. Мешкова И.Н. и Трубникова Г.В. – ОИЯИ, 2015
2. Status of Accelerator Complex NICA / Syresin E.M. et al. // Proc. 26th Russian Particle Accelerator Conference (RUPAC'18), Protvino, Russia, 01-05 October 2018 (Protvino, Russia). – Geneva, Switzerland JACoW Pub-lishing, 11/2018. – P. 12-16.
3. NICA Accelerator Complex at JINR / Syresin E.M. et al. // Proc. 10th International Particle Accelerator Conference (IPAC'19), Melbourne, Australia, 19-24 May 2019 (Melbourne, Australia). – Geneva, Switzerland JACoW Pub-lishing, 06/2019. – P. 452-454.
4. Three stages of the NICA accelerator complex / Kekelidze V.D. et al. // Eur. Phys. J. A. – 2016. – Vol. 52 – P. 211.
5. Релятивистская ядерная физика в ОИЯИ: от синхрофазотрона к коллайдеру NICA / Агапов Н.Н. и др. // УФН – 2016. – Т. 186, № 4. – с. 405-423.
6. Формирование поляризованных протонных пучков в ускорительном комплексе NICA / Сыресин Е.М. // Физика элементарных частиц и атомного ядра – 2021. – Т. 52, вып. 5. – с. 1305-1341.
7. Kunzler J.E., Buehler E., Hsu F.S.L. and J. H. Wernick // Phys. Rev. Lett. – 1961. – Feb. – Vol. 6, no. 3. – P. 89-91.
8. Superconducting Magnets for the NICA Accelerator Collider Complex / Khodzhbagiyani H.G. et al. // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. – 2014. – June. – Vol. 24, no. 3. – P. 1-4.

А.Ф. Топунов¹, О.В. Космачевская¹

E-mail: aftopunov@yandex.ru

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

Взаимосвязь структуры и функции белков - одна из важнейших проблем в биохимии. Особенно интересны белки, разнообразные по строению [1, 2]. Такими являются гемоглобины (Hb), обнаруженные во всех царствах живой природы. Они являются объектами исследований практически во всех разделах биохимии, биофизики и медицины.

Дата возникновения Hb отодвинута на несколько млрд. лет назад, расширены представления об их функциях. Hb относят к архитектурным типам: «3/3 спиральный» и «2/2 спиральный сэндвичи». Последние — это «усеченные» Hb (Trgb), которые на 20-30 аминокислот короче, чем обычные. Они есть в эубактериях, простейших и растениях.

У животных известны 5 типов Hb: кислородпереносящие Hb крови и гемолимфы, миоглобины (Mb) мышц, и недавно открытые нейроглобин (Ngb), цитоглобин (Cygb) и андроглобин. Hb может содержаться и в плазме, и в форменных элементах крови. Железо гема в Ngb и Cygb находится в гексакоординированном состоянии (hхHb). По-видимому, hхHb возникли раньше, чем пентакоординированные. У человека 12 генов, кодирующих Hb. Hb есть и у беспозвоночных, некоторые из них также обладают функцией хранения O₂.

Очень долго Hb был известен только у бобовых растений (леглобин — Lb). Симбиотический Hb (Sgb) небобовых был открыт в 1983 г. в клубеньках *Parasponia*, также живущего в симбиозе с бактериями *Rhizobium*, и у актиноризных растений. Функция Lb — поддержание в клубеньках низкого уровня O₂ и обеспечения им клубеньковых бактерий. С 1985 г. стали известны и несимбиотические Hb (Nsgb): у родственника *Parasponia* — *Trema*, у бобовых, *Arabidopsis*'а, у однодольных ячменя и риса, у мохообразных и водорослей.

В 1986 г. Hb был выделен из бактерии *Vitreoscilla*, живущей в кишечнике коров. Hb обнаружены у многих прокариот, в том числе у архебактерий. Известны 2 группы бактериальных Hb: однодоменные и двудоменные, в том числе флавогемоглобины (Fgb). Fgb содержат гемсодержащий и редуктазный домен, гомологичный ферредоксинредуктазе. Fgb часто сосуществуют в бактериях с Trgb, что указывает на их различные функции.

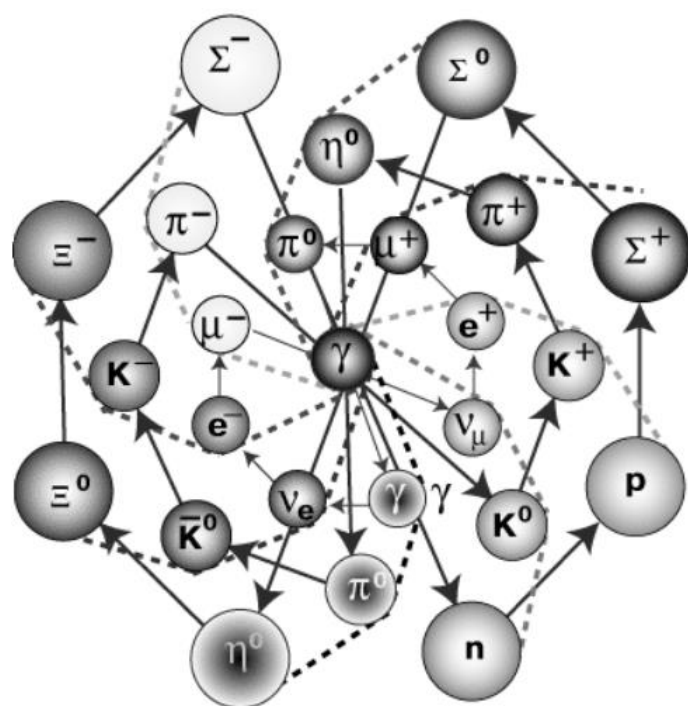
Первичной функцией Hb, вероятно, было взаимодействие с NO. Общим для большинства Hb является именно превращение NO в NO₃. Fgb патогенов защищают клетки от NO, образуемого макрофагами хозяина. Другие Hb тоже могут катализировать NO-диоксигеназную реакцию, например, SgbO₂ и NsgbO₂ могут окислять бактериальный и почвенный NO. Nsgb могли эволюционировать в Lb для связывания кислорода, то есть Nsgb являются предками Lb, как Ngb и Sgb — предками Hb и Mb млекопитающих.

Некоторых Hb связывают H₂S. Hb вестиментифер полихет и моллюсков накапливают H₂S, транспортируя его к микросимбионту — сульфидоксилирующим бактериям. Многие Hb взаимодействуют с активными формами кислорода, в том числе проявляют пероксидазную активность. Очень важен процесс глики Hb при карбонильном стрессе. Хуже изучена сенсорная функция, хотя для некоторых Hb она — основная. Один и тот же Hb, как правило, выполняет несколько функций, хотя и с разной эффективностью. Дополнительные функции Hb расширяют возможности адаптационного ответа организма.

Совместно с НИЯУ МИФИ нами была разработана пилотная версия компьютерной экспертной системы для диагностики анемий и гемоглобинопатий, использующая данные о состоянии Hb в организме, в том числе о соотношении его различных форм [3].

1. Космачевская О.В., Топунов А.Ф. // Прикл. биохимия и микробиология. 2009. Т. 45. № 6. С. 627-653.
2. Vinogradov S.N., Moens L. // J. Biol. Chem. 2008. V. 283. No. 14. P. 8773-8777.
3. Насыбуллина Э.И. и др. // Краткие сообщения по физике. 2015. Т. 42. № 7. С. 22-27.

ФИЗИКА АТОМНОГО ЯДРА И ЧАСТИЦ



Сверхтонкие магнитные аномалии и ядерная намагниченность в изотопах калия и золота

С.Д. Холмес^{1,2}, Ю.А. Демидов,^{1,2,3} М.Г. Козлов^{1,3}

E-mail: sebastian.holmes2001@gmail.com

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

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова, Санкт-Петербург, Россия

Магнитные моменты ядер короткоживущих изотопов калия и золота можно извлечь из констант сверхтонкой структуры, измеренных экспериментально [1, 2]. 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). Мы рассматриваем поправку Бора–Вайскопфа как произведение атомного и ядерного множителей [3]. Для расчёта спектра и свойств многоэлектронных атомов использовался пакет программ CI-MBPT [4]. С помощью модельного оператора [5] были учтены поправки КЭД к энергиям переходов и константам сверхтонкой структуры (СТС). Мы провели расчёты констант СТС для основного и первого возбуждённого состояний калия и золота, также были выполнены расчёты атомных множителей к поправке Бора–Вайскопфа для основных состояний K и Au [6, 7]. Это позволяет извлечь из экспериментальных данных ядерные вклады в поправки Бора–Вайскопфа ($d_{\text{нuc}}$) для целого ряда изотопов. С другой стороны 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 и золота с ядерным спином $I = 3/2$, потому что они достигают больших значений и являются причиной больших сверхтонких магнитных аномалий. Исследование таких изотопов 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 № 23-22-00079

1. J. Papuga et al., “Shell structure of potassium isotopes deduced from their magnetic moments,” Phys. Rev. C, **90**, 034321 (2014).
2. A. E. Barzakh et al., “Hyperfine anomaly in gold and magnetic moments of $I^\pi = 11/2^-$ gold isomers,” Phys. Rev. C, **101**, 034308 (2020).
3. Е. А. Коновалова, Ю. А. Демидов, М. Г. Козлов, “Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии в многоэлектронных атомах,” Оптика и спектроскопия, **10**, 1420 (2020).
4. M. G. Kozlov et al., “CI-MBPT: A package of programs for relativistic atomic calculations based on a method combining configuration interaction and many-body perturbation theory,” Comput. Phys. Commun., **195**, 199 (2015).
5. V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, “Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms,” Phys. Rev. A, **88**, 12513 (2013).
6. Yu. A. Demidov, et al., “Bohr-Weisskopf effect in the potassium isotopes,” Phys. Rev. C, **107**, 024307 (2023).
7. Yu. A. Demidov, et al., “Atomic calculations of the hyperfine-structure anomaly in gold,” Phys. Rev. A, **103**, 032824 (2021).

Разработка компьютерной модели процесса деканалирования протонов с энергией 1 ГэВ в монокристаллах кремния

П.Ю. Иванова^{1,2}

E-mail: pouriva@gmail.com

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

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

К настоящему времени каналирование заряженных частиц в кристаллах широко используется для управления и формирования пучков высоких энергий на ускорителях и коллайдерах [1].

Физическим параметром, существенно влияющим на кристаллооптические решения, является длина деканалирования, определяющая ослабление пучка каналированных частиц из-за кулоновского рассеяния на электронах и ядрах.

В недавно выполненном на синхроциклотроне ПИЯФ эксперименте по каналированию протонов с энергией 1 ГэВ [2] длина деканалирования была найдена равной 1.9 мм, что несколько расходится с оценкой, основанной на более ранних исследованиях [3], равной 1.0 мм. Объяснение может быть связано с различием процесса деканалирования протонов от торцевого захвата в режим каналирования и процесса деканалирования протонов от объемного захвата в режим каналирования.

Для изучения причин расхождения ведется разработка компьютерной модели процесса деканалирования при различных условиях захвата 1 ГэВ протонов в режим каналирования. В докладе будет представлено краткое описание модели и некоторые результаты ее тестирования.

1. В. М. Бирюков, В. И. Котов, Ю.А. Чесноков, *Управление пучками заряженных частиц высоких энергий при помощи изогнутых монокристаллов* // *Успехи физических наук* **164**, 1017, 1994.
2. Д. А. Амерканов, Л. А. Вайшнене, Ю. А. Гавриков, Б.Л. Горшков, А.С. Денисов, Е.М. Иванов, П.Ю. Иванова, Ю.М. Иванов, М.А. Кознов, В.И. Мурзин, Л.А. Щипунов, *Эксперимент по высокоэффективному отклонению протонного пучка с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом на синхроциклотроне ПИЯФ*, Письма в ЖЭТФ **118**, 551, 2023.
3. V.M. Samsonov, *The Leningrad experiment on volume capture*, in *Relativistic Channeling NATO ASI series B: Physics* **165**, 129, 1987.

Моделирование адсорбции соединений астата на поверхности золота***Е.А. Коновалова¹, А.А. Шалаевский², Ю.А. Демидов^{1,2,3}***

E-mail: lenaakonovalova@gmail.com

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский Институт», Гатчина, Россия*²*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова, Санкт-Петербург, Россия*³*Московский государственный университет им. Ломоносова, Москва, Россия*

Уникальные свойства изотопа астата-211 несколько десятилетий привлекают внимание медиков, использующих ионизирующее излучение для лечения онкологических больных. Как излучатель α -частиц ^{211}At идеально подходит для направленной терапии злокачественных опухолей за счет периода полураспада, линейной передачи энергии и отсутствия токсичных продуктов радиоактивного распада. Сложность получения изотопов и фрагментарно изученные химические свойства затрудняют разработку радиофарм препаратов на основе астата.

Газовая хроматография на поверхности золота – один из немногих способов изучения свойств соединений астата [1]. Интерпретация этих экспериментальных данных осложняется тем, что и At может образовывать молекулярные соединения. В частности, обсуждается возможность образования AtOH, но используемые экспериментальные методы позволяют определить только наличие At в месте адсорбции по анализу цепочек α -распадов. Недостающая информация может быть получена на основании моделирования электронной структуры адсорбционных комплексов.

Ранее мы рассчитали энергии адсорбции единичных атомов At и молекул AtOH на поверхности золота [2]. В данном докладе мы обсудим возможный механизм образования молекул AtOH. Для расчётов использовались методы релятивистской теории функционала плотности в сочетании с релятивистскими псевдопотенциалами малого остова. Были вычислены энергии адсорбции атомов At и OH групп на поверхности золота. Эти энергии оказались близки друг к другу. Кроме того, было получено, что энергия, необходимая для удаления OH группы из молекулы AtOH, больше, чем энергия связи OH с поверхностью золота [3]. А значит реакция образования $\text{At} + \text{OH} \rightarrow \text{AtOH}$ на поверхности энергетически выгодна.

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

1. A. Serov et al., “Adsorption interaction of astatine species with quartz and gold surfaces,” *Radiochim. Acta*, **99**, 593 (2011).
2. Yu. A. Demidov, A. V. Zaitsevskii, “Adsorption of the astatine species on a gold surface: a relativistic density functional theory study,” *Chem. Phys. Lett.*, **691**, 126 (2018).
3. Yu. A. Demidov, A. V. Zaitsevskii, “A comparative study of molecular hydroxides of element 113 (I) and its possible analogs: Ab initio electronic structure calculations,” *Chem. Phys. Lett.*, **638**, 21 (2015).

Исследование кинетики адсорбции изотопов урана на границе полярной и неполярной среды

Д.А. Румянцева, В.Г. Зиновьев, И.А. Митропольский

E-mail: rumyantseva_da@pnpi.nrcki.ru

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

Гамма-спектрометрическим методом исследована кинетика адсорбции урана в комплексах $UO_2(NO_3)_2 \cdot 2TBФ$ на поверхности полипропилена $(C_3H_6)_n$ в экстракционной системе на основе раствора азотной кислоты и экстрагента трибутилфосфата (ТБФ).

В гетерогенной системе скорость адсорбции на границе твердая фаза–жидкость зависит от скорости молекулярной или конвективной диффузии реагирующих веществ и скорости химической реакции на границе раздела, протекающей по механизму физической или химической адсорбции [1]. Если лимитирующей стадией адсорбции является диффузия, то процесс описывается уравнением псевдо-первого порядка Ерофеева-Колмогорова. Если лимитирующей стадией адсорбции является химическая реакция, то процесс протекает по кинетическому механизму Хо и Маккея. Если скорости диффузии и химической реакции соизмеримы, то имеет место смешанный механизм. Эффективные параметры адсорбции были определены экспериментально в системах с различной концентрацией урана и ТБФ. Плотности органической и водной фаз определялись пикнометрически.

При малом количестве экстрагента у поверхности раствора на границе полипропилен–водная фаза формируется вертикальный слой органической фазы из молекул ТБФ и $UO_2(NO_3)_2 \cdot 2TBФ$. Для определения скоростей экспериментальные значения концентраций аппроксимировали модифицированной функцией Ланжевена. Установлено, что скорости процесса накопления ^{234}U , ^{235}U и ^{238}U на границе твердая фаза–жидкость у поверхности водной фазы подчиняются неравенству $V_{234} > V_{235} > V_{238}$ или что подвижность молекул $UO_2(NO_3)_2 \cdot (2 \cdot TBФ)$ с легкими изотопами урана выше [2].

1. Павлюченко М.М., Лазерко Г.А. Кинетика образования аммиакатов хлористого кадмия. // Журнал физической химии, Т. 28, № 1, 1954. С. 102-108.
2. Zinovyev V.G., Rumyantseva D.A. et al. Chemical uranium enrichment by light isotopes in a $(C_3H_6)_n \cdot TBФ \cdot 2HNO_3$ heterogeneous system. // Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry vol. 332, 2023, pp. 2027–2038

Построение электронных базисов для оптимального учета квантовоэлектродинамических эффектов в атомах

Е.В. Тряпицына¹, М.Ю. Кайгородов¹, В.А. Ерохин¹, Ю.А. Демидов^{1,2}, М.Г. Козлов^{1,2}

E-mail: elizavetatr39@gmail.com

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

²*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова, Санкт-Петербург, Россия*

Постоянное повышение точности атомных экспериментов требует учитывать квантовоэлектродинамические (КЭД) эффекты при расчете свойств атомов. В то же время, последовательные КЭД расчеты пока возможны только для самых простых атомов или ионов с несколькими электронами. В работе [1] предложен модельный потенциал, который позволяет приближенно учитывать КЭД поправки для расчета спектров более сложных атомов и ионов (см., например, [2]). Однако, для расчета КЭД поправок к другим атомным свойствам, таким, как вероятности переходов, расчеты становятся очень затратными, даже при использовании модельного потенциала. Это связано с тем, что КЭД поправки чувствительны к поведению волновой функции на малых расстояниях, а амплитуды переходов в основном зависят от больших расстояний. Расчеты многоэлектронных атомов обычно проводятся с использованием разложения волновой функции по базисному набору электронных орбиталей. Необходимость аккуратного представления электронной волновой функции как на малых, так и на больших расстояниях ставит жесткие требования к полноте используемого базиса. Поэтому так важно разрабатывать методы построения достаточно полных, но не слишком длинных базисов.

В современных атомных расчетах используются разные способы построения базисов. Достаточно простой и эффективный способ был предложен в работе [3]. Часто используется базис В-сплайнов, предложенный в работе [4]. Способы улучшения свойств этих базисов обсуждались в работах [5,6]. В настоящей работе мы предлагаем для ускорения сходимости добавлять в базисный набор орбитали, построенные из производных Дирак-Фоковских орбиталей по радиальной переменной. Такие орбитали позволяют описывать радиальные растяжения и сжатия электронных волновых функций под действием малых возмущений, вызываемых, например, учетом модельного КЭД потенциала.

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

1. V.M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, “Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms,” *Phys. Rev. A*, **88**, 12513 (2013).
2. I.I. Tupitsyn, M. G. Kozlov, M. S. Safronova, V. M. Shabaev, and V. A. Dzuba, “Quantum Electrodynamical Shifts in Multivalent Heavy Ions,” *Phys. Rev. Lett.*, **117**, 253001 (2016).
3. P. Bogdanovich and G. Žukauskas, “The simplified superposition of configurations in the atomic spectra,” *Sov. Phys. Collection*, **23**, 5 (1983).
4. W. R. Johnson, S. A. Blundell, and J. Sapirstein, “Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B-splines,” *Phys. Rev. A*, **37**, 307 (1988).
5. M. G. Kozlov, S. G. Porsev, and V. V. Flambaum, “Manifestation of the Nuclear Anapole Moment in the M1 Transitions in Bismuth,” *J. Phys. B*, **29**, 689 (1996).
6. M. Kozlov and I. Tupitsyn, “Mixed Basis Sets for Atomic Calculations,” *Atoms*, **7**, 3 (2019).

Н.Р. Бикметов¹, Д.С. Флусова¹, А.С. Гоголев¹

E-mail: nrb1@tpu.ru

¹*Национальный Исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

Сибирский кольцевой источник фотонов (СКИФ) – строящийся в Сибири в наукограде Кольцово в Новосибирской области источник синхротронного излучения нового поколения. Основной особенностью данного источника является высокий эмиттанс генерируемого пучка. Завершение строительства намечено в 2024 году. В рамках работы над ЦКП СКИФ встала задача о разработке и использовании гиперспектрального счетчика рентгеновского излучения на станции 1-2 «Структурная диагностика» на дифрактометре высокого разрешения. Потенциально, данная разработка может также найти применение и в разработке современных томографов. Для успешного создания прототипа устройства, необходимо проведения ряда подготовительных исследовательских работ, в частности компьютерного моделирования и создание виртуального аналога. Для прототипа данного счетчика предполагается использование кремниевых фотоумножителей (SiPM).

Целью данной работы является разработка цифровой модели SiPM серии EQR-15 и исследование изменения параметров отклика при изменении температуры сенсора.

Модель SiPM была создана с помощью фреймворка Allpix² [1], позволяющий моделировать полупроводниковые устройства и процессы, проходящие в них, начиная от прохождения ионизирующего излучения через вещество сенсора, заканчивая оцифровкой сигнала. Сцинтиллятор на основе кристалла LaBr₃ был смоделирован в СПО GEANT4 [2] для генерации спектра, попадающего на сенсор SiPM. Обработка экспериментальных данных осуществлялась с помощью средств CERN ROOT [3].

Для оценки адекватности модели SiPM был проведен эксперимент, в рамках которого сигнал с SiPM снимался осциллографом при постепенном равномерном нагреве сенсора. Сигналы с SiPM были получены для диапазона температур от 30 до 70°C.

В результате обработки данных моделирования было установлено, что угловой коэффициент изменения приведенной ширины сигнала SiPM в зависимости от температуры составил $\sim 0,0049 \pm 0,0001$; для экспериментальных данных $\sim 0,0066 \pm 0,0007$. Подобное различие значений коэффициентов может быть обусловлено ограничениями использованной экспериментальной установки. Для уточнения результатов планируется проведение более сложного эксперимента с использованием климатической камеры.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы «Наука» (Проект № FSWW-2023-0003)

1. Spannagel S. et al. Allpix²: A modular simulation framework for silicon detectors // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2018. V. 901. P. 164–172.
2. Agostinelli S. et al. Geant4 – a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. V. 506. No 3. P. 250–303.
3. Brun R., Rademakers F. ROOT – An object oriented data analysis framework // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 1997. V. 389. No 1–2. P. 81–86.

Применение ядерных реакций для определения тормозных способностей заряженных частиц

Т.Л. Бобровский, П.С. Пручаченко, А.Ф. Гурбич, М.В. Боховко

E-mail: timofeybobrovskiy@gmail.com

Акционерное общество «Государственный научный центр Российской Федерации – Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского», г. Обнинск, Россия

Тормозные способности заряженных частиц являются фундаментальной характеристикой взаимодействия ионизирующего излучения с веществом. Экспериментальные данные по многим комбинациям ионов и мишеней имеют расхождения как между собой так и в сравнении с теоретическими предсказаниями. В некоторых случаях расхождения могут достигать 20% и более для тяжелых ионов. В таких критических приложениях как, например, радиотерапии, это может привести к переоценке или недооценки полученной дозы. Обычно для измерений тормозных способностей применяются стандартные методы, основанные на прямом измерении потерь ионов в тонких плёнках. Однако подобные методы имеют свои ограничения связанные с корректностью калибровки детекторов и определении толщины мишени. В данной работе мы хотим продемонстрировать ряд современных методов по определению тормозных способностей и пробегов заряженных частиц с использованием ядерных реакций, таких как упругое резонансное и резерфордовское рассеяние и резонансный захват протонов.

В первом случае тормозная способность определяется по высоте спектров обратного рассеяния. При этом необходимо чтобы сечение обратного рассеяния было точно известно. Этот метод достаточно хорошо описан в [1]. Во втором случае используются резонансные реакции налетающего иона с ядрами мишени. Это могут быть как реакции упругого обратного рассеяния так и реакции с вылетом других заряженных частиц [2]. Так же резонансные реакции на имплантированных ионах позволяют определять их пробеги.

1. N.P. Barradas et al. Accurate determination of the stopping power of 4He in Si using Bayesian inference // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 194, Issue 1, 2002, Pages 15-25
2. T.L. Bobrovskiy et al. Determination of stopping power for light ions using resonance backscattering // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 543, 2023, 165094.

Разработка β - спектрометра для измерения электронных спектров в присутствии интенсивного γ - фона

Е.Ф. Бубнов^{1,2}, А.В. Дербин¹, И.С. Драчев¹, Д.В. Иванов^{1,2}, В.А. Еремин³, И.М. Котина¹, В.Н. Муратова¹, М.В. Трушин¹, Е.В. Унжаков¹

E-mail: Bubnov_EF@pnpi.nrcki.ru

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

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

³Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

При измерении β -спектров облучённого ядерного топлива возникает проблема влияния γ -фона, имеющего высокую скорость счёта [1]. Для точного измерения β -спектров в подобных условиях, нашим коллективом было предложено использовать измерительную установку-годоскоп, состоящую из пролётного планарного детектора и Si(Li)-детектора. Вероятность взаимодействия γ -квантов с рабочим объёмом пролётного детектора мала, в отличие от электронов, которые теряют часть своей кинетической энергии внутри детектора, порождая электрический заряд. Si(Li)-детектор фиксирует как γ -кванты, так и электроны, которые полностью теряют свою кинетическую энергию в объёме детектора. Недостатком предложенной установки будет являться размытие β -спектров из-за прохождения электронами планарного детектора.

Для оценки степени ухудшения разрешения была проведена серия измерений с использованием ²⁰⁷Pb. Данный радионуклид испытывает электронный захват с переходом в возбуждённое состояние, при распаде которого возникают конверсионные электроны, γ -кванты, а также рентгеновское излучение. Эксперимент проводился в лаборатории низкофоновых измерений. В β -спектрометр помещались два полупроводниковых детектора: планарный и Si(Li), охлаждаемые жидким азотом. Планарный детектор толщиной 300 μ m располагался на расстоянии 1 см от источника ионизирующего излучения, а Si(Li) толщиной 8 мм, на 1 см ниже планарного детектора. Измерение спектров проводилось с использованием АЦП и ПО CAEN. Обработка результатов при помощи метода совпадений [2] проводилась в программной среде ROOT CERN. При помощи написанной программы изучались совпадающие события в заданном временном окне. Для получения максимально возможного разрешения амплитуды обоих детекторов суммировались.

В ходе эксперимента были получены следующие результаты: в случае использования одного Si(Li)-детектора полуширина пика конверсионного электрона (FWHM) составляла приблизительно 1.8 кэВ [3], для спектра электронов, снятых с Si(Li)-детектора после пролёта планарного FWHM = 30.76 \pm 0.18 кэВ. Разработанная нами модель обработки данных позволяет получать спектры конверсионных электронов ²⁰⁷Pb с итоговым разрешением FWHM = 4.79 \pm 0.04 кэВ при интенсивном подавлении γ -фона.

Подробнее о результатах будет доложено на Конференции.

1. Мухин, К. Н. Экспериментальная ядерная физика : учебник : в 3 томах / К. Н. Мухин. — 6-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, [б. г.]. — Том 3 : Физика элементарных частиц — 2008. — 432 с. — ISBN 978-5-8114-0741-5.
2. Рехин Е. И., Чернов П. С., Метод совпадений, М., 1976.
3. I.E. Alekseev, et al., 4 π spectrometer of β -decay electrons with Si(Li)-detectors // Journal of Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2023. Article 168294.

Исследование работы прототипа (АСТАФ2) активной мишени для экспериментов по комптоновскому рассеянию

А.Ю. Арутюнова¹, Е.М. Маев¹

E-mail: arutiunova_ai@npri.nrcki.ru

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

Исследование рассеяния гамма-квантов (комптоновского рассеяния) на протонах и легких ядрах позволяет определить одну из фундаментальных характеристик нуклона — поляризуемость. В ПИЯФ был разработан новый метод исследования этого процесса с использованием активной мишени, которая одновременно является газовой мишенью и детектором ядер отдачи [1].

Активная мишень (АСТАФ2) представляет собой аксиально-симметричную ионизационную камеру с азимутальным угловым захватом 2π . АСТАФ2 обеспечивает возможность работы с различными газами (H_2 , D_2 , He, CH_4 , N_2 и Ar) при давлении от 0.1 до 10 бар. Полная энергия частицы отдачи измеряется с точностью $\sigma = 20 - 30$ кэВ в энергетическом диапазоне от 0.3 МэВ до 20 МэВ. Энергетический порог составляет ~ 150 кэВ, что обеспечивает 100% эффективность регистрации частиц отдачи с $T_r > 300$ кэВ [2]. Активная мишень имеет специальную сегментированную анодную структуру, которая дает возможность различать типы частиц отдачи (p, d, t, 3He и 4He), используя корреляцию между энергией и пробегом частиц отдачи.

В ПИЯФ были проведены несколько исследований характеристик АСТАФ2. Одно из них - измерение скорости дрейфа электронов, возникающих в результате ионизации. Оно было проведено в нескольких рабочих газах, которыми была наполнена активная мишень: He, He+5%N₂, Ar. Значения скоростей совпадают с известными, но с учетом характеристик камеры и условий проведения. Например, было видно и подтверждено химическим анализом, что в Ar при малом давлении 0.32 атм с течением времени из стенок камеры выделяется воздух, который влияет на величину скорости дрейфа. При давлении 1.2 атм этого эффекта уже не наблюдается. В He также было отмечено изменение скорости дрейфа от времени. Такое изменение указывает на то, что измерения были проведены не в чистом He, а в He + 0.06% Ar, что подтвердил химический анализ, т.к. ранее камера была наполнена аргоном и его часть выделялась из стенок камеры. Также была проведена калибровка, с помощью которой мы сравнили сигналы с катода и анода от альфа-источника. Полученные результаты характеризуют чистоту газа. Например, при добавлении в He 5%N₂ разница между катодным и анодными линиями становится больше, что говорит о снижении чистоты газа и увеличении вклада прилипания и рекомбинации. После с помощью построения корреляции пробег-энергия была проверена выбранная калибровка. Результаты согласовались. Также были получены путем сравнения спектров относительные энергии ионизации в 2-х газах: в Ar – 27.7 эВ; в He+5%N₂ – 36 эВ [3].

1. O. Yevetska, S. Watzlawik, J. Ahrens, G.D. Alkhasov, V.P. Chizhov, E.M. Maev et al., Nuclear instruments and methods, A 618, 160-167 (2010) "New experimental method for investigation of the nucleon polarizabilities"
2. 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
3. Королев Г.А. и др., Energy Dependence of W Values for Protons in Hydrogen. – Гатчина, 2014. – 12 с. – (Препр. / ПИЯФ; No 2014)

Вычисление плотности индуцированного заряда вакуума методом конечного базисного набора

В.К. Иванов, А.В. Волотка, Д.А. Глазов

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

Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург

Численные расчеты квантово-электродинамических (КЭД) поправок к атомному спектру требуют применения сложной вычислительной техники. Одна из таких поправок – поправка на вакуумную поляризацию (ВП) – может быть определена через плотность индуцированного заряда вакуума, которая позволяет получить вклад в эффективный потенциал ВП. Особенно проблема нахождения таких поправок становится актуальной при работе с тяжелыми ядрами, вблизи которых поле становится сильным, а скорости электрона становятся релятивистскими. В таких системах параметр $Z\alpha$ (α — постоянная тонкой структуры, Z — заряд ядра) перестает быть достаточно малой величиной, и значение поправок высших порядков становится более заметным, и что сильно ограничивает применение расчетов с разложением по $Z\alpha$. Однако, стандартные аналитические расчеты ВП основываются на использовании разложения по параметру $Z\alpha$, поэтому на сегодняшний день вычисления для эффективного потенциала ВП ограничены вкладом $\alpha(Z\alpha)^3$ [1]. Стандартный метод вычисления этой поправки заключается в использовании функции Грина радиального уравнения Дирака, парциальном разложении, повороте Вика и последующем численном вычислении получившихся интегралов [1]. Такие вычисления являются сложными как с точки зрения аналитических выкладок, так и с точки зрения численных расчетов, поэтому расчеты ВП петель, как правило, ограничиваются рассмотрением довольно простых случаев.

Указанные сложности, связанные с вычислением поправок, возникающих из-за эффекта ВП, привели к появлению альтернативных вычислительных методов. Так, в статье [2] было показано, что для вычисления ВП можно использовать метод конечного базисного набора, который успешно использовался до этого для нахождения атомных спектров. Такой подход позволяет избежать проблем, связанных со стандартным подходом, основанным на вычислении функции Грина, так как вместо дискретизации пространства интегрирования, решение задачи ищется в виде суперпозиции непрерывных функций. Кроме того, при данном подходе задача интегрирования по существу заменяется алгебраической задачей на нахождение собственных векторов.

В данной работе, мы использовали предложенный метод для вычисления плотности ВП, применяя базис из функций Б-сплайнов, а также повторили вычисления на базисных функциях (гауссианах) из статьи [2]. Базис Б-сплайнов является популярным выбором для базисных функций, и успешно используется для вычислений атомных спектров [3]. Мы получили графики, повторяющие с определенной точностью вычисления из [1], полученные методом функций Грина, а также провели сравнение двух базисных наборов. Нами были написаны коды, позволяющие проводить вычисления для различных параметров задачи, таких как количество базисных функций и их свойства. Данная работа позволит использовать метод конечного базиса для задач по вычислению более сложных диаграмм с ВП петлей.

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

1. Mohr P.J, Plunien G., Soff G. QED corrections in heavy atoms // Physics Reports. 1998. V. 293. No. 5-6. P. 227–369.
2. Salman M., Saue T. Calculating the many-potential vacuum polarization density of the Dirac equation in the finite-basis approximation // Phys. Rev. A. 2023. V. 108. No. 1. P. 012808.
3. Johnson, W. R., Blundell, S. A., Sapirstein, J. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines // Phys. Rev. A. 1988. V. 32 No. 2. P. 307–315.

Поиск проявления космологических реликтовых нейтрино в β -спектре ^{210}Bi

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

E-mail: ivanov_dv@npni.nrcki.ru

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

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

Существование реликтового нейтринного фона предсказывается современной космологической моделью, и его непосредственное обнаружение позволило бы изучить прошлое Вселенной в диапазоне 0,1 - 1 с после Большого взрыва. На данный момент самым перспективным методом обнаружения реликтового нейтринного фона считается реакция обратного β -распада на ядрах трития [1, 2]. Фундаментальный интерес представляет исследование возможности регистрации захвата реликтовых нейтрино более тяжёлыми ядрами, подверженными β -распаду.

Используя результаты 634-часовых измерений β -спектра ^{210}Bi , выполненных со спектрометром на основе Si(Li)-детекторов [3], мы искали проявления реакции $\nu_e + ^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Po} + e^-$ в области граничной энергии $Q_\beta = 1162$ кэВ. Дополнительно производился поиск пика моноэнергетических электронов в диапазоне от Q_β до $Q_\beta + 30$ кэВ от захвата стерильных нейтрино с массой около 10 кэВ, которые являются мотивированными кандидатами на роль частиц тёмной материи [4]. Проведённый анализ показал отсутствие в измеренном спектре статистически значимых пиков, связанных с реакцией захвата нейтрино ядрами ^{210}Bi . В результате установлены верхние пределы на произведение потока нейтрино Φ_ν и сечение реакции захвата реликтовых нейтрино σ_ν . Для нейтрино с массой $m_\nu \approx 0$ полученное ограничение составило $\sigma_\nu \times \Phi_\nu \leq 1.4 \times 10^{-12} \text{ c}^{-1}$ (90% у. д.) [5].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проекты № 21-12-00063 и № 22-22-00017)

1. Weinberg S. Universal Neutrino Degeneracy // Physical Review. 1962. Vol. 128. P. 1457-1473. doi: 10.1103/PhysRev.128.1457.
2. Betti M. G. et al. Neutrino Physics with the PTOLEMY Project: Active Neutrino Properties and the Light Sterile Case // Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. 2019. N 07. doi: 10.1088/1475-7516/2019/07/047.
3. Alekseev I. E. et al. Precision measurement of the ^{210}Bi β -spectrum // Physical Review C. 2020. Vol. 102. Iss. 6. doi: 10.1103/PhysRevC.102.064329.
4. Adhikari R. et al. White Paper on keV sterile neutrino Dark Matter // Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. 2017. N 01. doi: 10.1088/1475-7516/2017/01/025.
5. Бубнов Е. Ф. и др. Поиск проявления космологических реликтовых нейтрино в β -спектре ^{210}Bi : Препринт – 3074 / Гатчина: Изд-во Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», 2023. 12 с.

Поиск корреляций нейтринных событий в детекторе Borexino с гравитационными волнами из базы данных GWTC-3

И.С. Ломская¹

E-mail: lomskaya_is@pnpi.nrcki.ru

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

Наблюдение гравитационных волн детекторами LIGO, Virgo побудило интенсивные исследования данных процессов с помощью нейтринных детекторов, что можно считать началом эры многоканальной астрономии. Комбинация данных с гравитационных, нейтринных и электромагнитных детекторов может дать более глубокое понимание астрофизических и космологических процессов.

Детектор Borexino - жидкий сцинтилляционный детектор, установленный в Национальной Лаборатории Гран-Сассо на глубине 3800 м водяного эквивалента. Такое расположение обеспечивает подавление потока космических мюонов в 10^6 раз. Конструкция детектора построена на концепции ступенчатого экранирования, и представляет собой стальную сферу, окруженную слоем водяной защиты в 2100 т сверх-чистой воды для подавления внешних гамма фонов и нейтронного фона, просматриваемый 208 8'' ФЭУ. Водяной слой защиты так же используется в качестве мюонного вето. Внутренняя часть заполнена 278 т сверх-чистого сцинтиллятора на основе псевдокумола ($C_6H_3(CH_3)_3$) с добавкой люминофора PPO, и просматривается 2212 8'' ФЭУ, которые равномерно расположены по внутренней поверхности сферы. Регистрация нейтрино и антинейтрино в детекторе происходит посредством упругого рассеяния на электронах. Регистрация электронных антинейтрино происходит через реакцию обратного бета-распада на протонах с пороговой энергией в 1.8 МэВ.

В данной работе использовалась обновленная база данных LIGO/Virgo GWTC-3 [1] включающая периоды наблюдения O1, O2, O3. За период с сентября 2015 г по март 2020 наблюдалось 93 события гравитационных волн, 87 из которых - это слияния черных дыр, 2 - слияние нейтронных звезд и 4 события слияния нейтронной звезды и черной дыры.

Мы исследовали сигналы от рассеяния нейтрино на электронах с видимой энергией выше 250 кэВ, с временным окном в ± 1000 с относительно регистрации конкретного события гравитационной волны [2]. Рассматривались два спектра нейтрино: моноэнергетический и спектр для нейтрино от сверхновых, полученный из модифицированного распределения Ферми-Дирака для различных температур. Мы искали превышение счета нейтринных событий в детекторе Borexino для упругого рассеяния на электронах и превышение счета антинейтринных событий по реакции обратного бета-распада на протоне в корреляции с событиями гравитационных волн из базы данных GWTC-3. Статистически значимого превышения не было обнаружено. В результате были поставлены новые ограничения на поток монохроматических нейтрино, нейтрино сверхновых и электронных антинейтрино всех ароматов в диапазоне энергий 0.5-5 МэВ.

1. GWTC-3: Compact Binary Coalescences Observed by LIGO and Virgo During the Second Part of the Third Observing Run // arXiv:2111.03606v2.
2. BOREXINO Coll. Borexino's search for low-energy neutrinos associated with gravitational wave events from GWTC-3 database // Eur. Phys. J. C. 2023. V. 83. N. 6. P. 538. doi:10.1140/epjc/s10052-023-11688-4.

**Ландшафт масс сверхтяжёлых элементов и
обнаружение оболочечных эффектов стабилизации
Ю.В. Нечипоренко^{1, 2}**

E-mail: yurichnt@bk.ru

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

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

Как известно, оболочечные эффекты повышают время жизни нуклидов, принадлежащих сверхтяжелым элементам. Однако существование острова стабильности предсказывается вблизи заполненных оболочек протонов $Z = 114-120$ и нейтронов $N = 184$. В то же время расположение центра и протяженность этого острова остаются неопределенными. Высокоточная масс-спектрометрия позволяет напрямую измерять энергии связи (массы) нуклидов и, таким образом, определять силу оболочечных эффектов [1].

Самым точными и чувствительным инструментом масс-спектрометрии сверхтяжелых нуклидов являются ловушки Пеннинга. В них применяется метод фазового отображения ионного циклотронного резонанса (PI-ICR) для определения циклотронной частоты захваченного одиночного иона, которая напрямую зависит от массы и его заряда [2].

Измерив массу одного из нуклидов альфа цепочки и зная точные энергии альфа распадов, можно получить массы всех нуклидов, составляющих альфа цепочки. А так как область нейтронодефицитных сверхтяжёлых нуклидов «усыпана» альфа-излучателями, определение их масс позволяет определить массовый ландшафт значительной части сверхтяжёлых элементов. Полученный ландшафт измеренных масс нуклидов позволил обнаружить стабилизирующие эффекты, вызываемые оболочечными поправками в энергии связи нуклида.

В докладе будет рассказано об обнаружении оболочечных щелей, приводящих к стабилизирующим эффектам свойств нуклидов при числе нейтронов $N = 152$ и $N = 162$ в области сверхтяжёлых элементов.

1. Oganessian Y. et al. Route to islands of stability of superheavy elements //Physics of Atomic Nuclei. – 2000. – Т. 63. – №. 8. – С. 1315-1336.
2. Eliseev S. et al. Phase-imaging ion-cyclotron-resonance measurements for short-lived nuclides //Physical Review Letters. – 2013. – Т. 110. – №. 8. – С. 082501.

Криогенная газовая ионная ловушка: вакуумные и криогенные испытания

А.С. Новоселов, А.М. Родин, Л. Крупа, В.Ю. Веденеев, А.В. Гуляев, А.В. Гуляева, П. Когоут, А. Когоутова, А.Б. Комаров, А. Опихал, А.В. Подшибякин, В.С. Саламатин, Е.В. Чернышева, С.А. Юхимчук, А.М. Абакумов

E-mail: noval@jinr.ru

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Современные прецизионные эксперименты в области ядерной физики предъявляют высокие требования к параметрам ионного пучка. Данное утверждение справедливо как для первичных пучков, ускоренных на ускорителе, так и для вторичных, полученных в результате той или иной ядерной реакции. Работа содержит информацию о создаваемой в Лаборатории ядерных реакций им. Г.Н. Флерова ОИЯИ установке под названием «Криогенная газовая ионная ловушка» или «Газкэтчер». В настоящее время эта установка находится в стадии монтажа, отладки и тестовых испытаний. Установка создается на основе аналогичной действующей, которая находится в GSI в Германии. Информацию по аналогичной установке можно найти в источниках [1] и [2].

Назначение Газкэтчера состоит в трансформации вторичного пучка редких ионов, полученных в результате ядерных реакций, от высокоэнергичного с большим эмиттансом к низкоэнергетическому с малым эмиттансом и малым разбросом по энергии.

Установка в упрощенном виде состоит из трех камер: термоизоляционный объем (теплая камера) внутри которой находится рабочий объем при криогенной температуре около 40 К (холодная камера) и на выходе из рабочего объема находится камера с радиочастотным квадруполем. Внутри холодной камеры по ходу движения ионов находятся: входное окно из титановой фольги, клетка, воронка и на выходе сопло Лавалья диаметром 0,6 мм. Клетка представляет собой систему электродов смонтированных вдоль стенок камеры. На клетке создан градиент постоянного напряжения. Воронка состоит из концентрических электродов с уменьшающимся диаметром в сторону сопла. К электродам воронки приложено высокочастотное напряжение и создан градиент постоянного напряжения. Вакуумная система сконструирована на базе безмасляных насосов. Состав и относительное количество остаточных газов контролируется квадрупольным масс-спектрометром. Охлаждение рабочей камеры и газа создано на базе криорефрижератора.

Принцип действия основан на торможении ионов в результате столкновений с рабочим газом, получении и сохранении зарядности ионов 1+ и 2+. Для решения данной задачи используется гелий особой высокой чистоты и криогенные условия. Направленное движение ионов к выходу из камеры происходит за счет градиентов электрических полей постоянного напряжения на клетке и воронке. Для исключения взаимодействия ионов с электродами воронки на соседние электроды также подается ВЧ напряжение с противоположной фазой. Выйдя из рабочей камеры через сопло, ионы попадают в радиочастотный квадруполь где происходит очистка от рабочего газа.

На текущий момент произведен монтаж вакуумных камер и оборудования, системы охлаждения рабочей камеры, системы диагностики остаточных газов, создана система управления. В результате испытаний достигнут уровень сверхвысокого вакуума в объеме рабочей камеры до напуска рабочего газа, получена расчетная криогенная температура в режиме протока газа и работающей электроники. Производится дальнейшая отладка и подготовка к эксперименту с радиоактивным источником для оценки работы установки в разных режимах и её эффективности.

1. Droese C. et al. The cryogenic gas stopping cell of SHIPTRAP //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2014. – Т. 338. – С. 126-138.
2. Eliseev S.A. et al. Extraction efficiency and extraction time of the SHIPTRAP gas-filled stopping cell //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2007. – Т. 258. – №. 2. – С. 479-484.

Анализ редкого распада $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+ \gamma$ в эксперименте NA62А.В. Охотников¹

E-mail: artem.okhotnikov@ihep.ru

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение «Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Протвино, Россия

Распад заряженного каона $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+ \gamma$ в настоящий момент является довольно плохо изученным. В двух экспериментах было зарегистрировано, соответственно, 7 [1] и 450 [2] распадов. В исследовании [2] было подтверждено соответствие величин дифференциального брэнчинга с расчетными значениями на основе киральной теории возмущений [3], но только для фотонов с энергией не менее 30 МэВ. В настоящее время измеренное значение брэнчинга данного распада составляет $(1,04 \pm 0,31) \cdot 10^4$ при условии $E_\gamma > 5$ МэВ. Экспериментальная установка NA62, имея превосходящие технические характеристики, позволяет получить многократно больше распадных событий и измерить параметры распада более точно, а также на большем диапазоне энергий фотонов.

В рамках данной работы был разработан и проведен отбор событий вида $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+ \gamma$. При помощи метода Монте-Карло смоделированы сигнальные и фоновые распады. Был измерен дифференциальный брэнчинг распада в зависимости от энергии фотона с шагом в 1 МэВ. Наблюдается хорошее соответствие в предсказаниями [3].

В ходе работы было отобрано 69068 ± 19 распадов $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+ \gamma$ и рассчитан брэнчинг процесса.

Количество событий с высокой (более 50 МэВ) энергией фотона было слишком мало для корректного расчета дифференциального брэнчинга. С этой целью для повышения точности результатов был применен метод анфолдинга данных с использованием заранее сгенерированного по методу Монте-Карло большого количества распадов $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+ \gamma$.

Полученные данные согласуются с полученным ранее значением брэнчинга процесса, а также дополняют его полученной впервые дифференциальной зависимостью брэнчинга от энергии фотона в диапазоне энергии от 10 до 70 МэВ.

1. V.V. Barmin et al. Experimental limits on the probabilities for the decays $K^+ \rightarrow e^+ \pi^0 \pi^0 \nu \gamma$ and $K^+ \rightarrow e^+ \pi^0 \pi^0 \pi^0 \nu$ // Sov. J. Nucl. Phys. 1992. V. 55. P. 547–548.
2. Shapkin, M.M., Akimenko, S.A., Artamonov, A.V. et al. Study of the decay $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+ \gamma$ in the OKA experiment // Eur. Phys. J. C. 2019. V. 79, P. 296.
3. D'Ambrosio, G., Ecker, G., Isidori, G. et al. $K \rightarrow \pi \pi \gamma$ in chiral perturbation theory // Z Phys C - Particles and Fields. 1997. V. 76. P. 301–310.

Результаты поисков распадов Бозона Хиггса на частицы Темной Материи в эксперименте АТЛАС

М.В. Покидова^{1,2}, Я.А. Бердников², Ю.Г. Нарышкин¹

E-mail: marina.pokidova@cern.ch

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

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

В работе представлены результаты исследований по поиску распадов Бозона Хиггса Стандартной модели (СМ) на частицы Темной Материи (ТМ) в эксперименте ATLAS Большого Адронного Коллайдера. Поиск распадов Бозона Хиггса на частицы ТМ проводится в различных процессах его образования [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 недостающей поперечной энергии E_T^{miss} и дополнительными физическими объектами, характерными для заданного процесса [2-5]. Для каждого канала было проведено сравнение с предсказаниями СМ и получены значения верхних пределов на вероятность распада. Результаты, полученные в различных каналах объединяются с целью улучшения точности полученных верхних пределов.

В исследованиях были использованы данные полученные за первый ($\sqrt{s}=7$ ТэВ, 8 ТэВ) и второй ($\sqrt{s} = 13$ ТэВ) рабочие периоды, соответствующие светимостям 4.9, 20.3 и 139 fb^{-1} соответственно [6]. Полученный наблюдаемый (ожидаемый) верхний предел при объединении результатов, полученных за первый и второй периоды работы составил 0,107 (0,077) при 95% доверительном интервале. Представлено сравнение полученных результатов с результатами экспериментов по прямому поиску частиц ТМ.

1. G. Arcadi, A. Djouadi, M. Raidal. Dark Matter through the Higgs portal, Physics Reports, Volume 842, 2020.
2. 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
3. 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.
4. 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.
5. 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.
6. ATLAS Collaboration, Combination of searches for invisible decays of the Higgs boson using 139 fb of proton-proton collision data at $s = 13$ TeV collected with the ATLAS experiment, Physics Letters B Volume 842, 2023.

Поиск индуцируемых аксиноподобными частицами T,P-нечётных взаимодействий в молекулах

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

E-mail: prosnyak.sergey@yandex.ru

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

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

Молекулы, содержащие атомы тяжёлых элементов, могут быть использованы для поиска «новой» физики за рамками стандартной модели с помощью прецизионных экспериментов, направленных на поиск эффектов нарушения симметрий фундаментальных взаимодействий, а именно пространственной четности P и обращения времени T. Одним из наиболее обсуждаемых источников T,P-нечётных взаимодействий в молекулах является электрический дипольный момент (ЭДМ) электрона [1]. На данный момент ненулевой ЭДМ электрона обнаружить не удалось, но было установлено ограничение на его значение. Наиболее точное ограничение было получено группой JILA в эксперименте с молекулярными катионами монофторида гафния HfF^+ [2].

Однако, нарушение симметрии фундаментальных взаимодействий в молекулах может быть индуцировано не только ЭДМ электрона, но и эффектом обмена виртуальными аксиноподобными частицами между электроном и ядром, а также между двумя электронами. Оценка этого эффекта для ряда атомов и молекул была проведена, например, в работе [3]. Детальное теоретическое исследование индуцируемых аксиноподобными частицами T,P-нечётных взаимодействий в молекулярном катионе HfF^+ с прецизионным учётом эффектов межэлектронной корреляции было проведено нами в работе [4]. Для этого были разработаны программы для вычисления матричных элементов соответствующих операторов взаимодействия. В результате были установлены ограничения на константы взаимодействия в широком диапазоне рассматриваемых масс аксиноподобных частиц.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-72-10019-П и гранта Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» по проекту № 21-1-2-47-1

1. Safronova M. S. et al. Search for new physics with atoms and molecules // *Reviews of Modern Physics*. – 2018. – Т. 90. – №. 2. – С. 025008.
2. Roussy T. S. et al. An improved bound on the electron's electric dipole moment // *Science*. – 2023. – Т. 381. – №. 6653. – С. 46-50.
3. Stadnik Y. V., Dzuba V. A., Flambaum V. V. Improved limits on axionlike-particle-mediated P, T-violating interactions between electrons and nucleons from electric dipole moments of atoms and molecules // *Physical review letters*. – 2018. – Т. 120. – №. 1. – С. 013202.
4. Prosnyak S. D., Maison D. E., Skripnikov L. V. Updated Constraints on T, P-Violating Axionlike-Particle-Mediated Electron–Electron and Electron–Nucleus Interactions from HfF^+ Experiment // *Symmetry*. – 2023. – Т. 15. – №. 5. – С. 1043.

**Исследование материалов первой стенки термоядерного реактора
методами ядерного микроанализа**

П.С. Прусаченко, А.Ф. Гурбич, М.В. Боховко, Т. Л. Бобровский

E-mail: pprusachenko@ippe.ru

Акционерное общество «Государственный научный центр Российской Федерации – Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского», г. Обнинск, Россия

Первая стенка вакуумной камеры термоядерной установки непосредственно соседствует с плазмой. Поэтому при работе установки плазма и внутренняя поверхность первой стенки взаимодействуют, что может приводить к сильному изменению физических свойств, как плазмы, так и материала первой стенки. Главные аспекты влияния плазмы на первую стенку, подлежащие изучению, – это проникновение, накопление и диффузия ионов топливной компоненты и продуктов ядерных реакций в материале первой стенки и радиационное повреждение, распыление и блистеринг поверхности при ионном соударении и захвате. Среди различных методов диагностики поверхности элементный анализ с использованием ускоренных ионных пучков занимает исключительное место благодаря его способности давать количественные результаты без образцов сравнения, точности и изотопной чувствительности [1].

Настоящий доклад посвящен возможностям и опыту применения методов ядерного микроанализа, реализованных на пучках тандемного ускорителя АО «ГНЦ РФ-ФЭИ», для анализа материалов первой стенки термоядерных установок [2]. Используемые методики позволяют извлекать информацию о содержании и профиле распределения примесных атомов в поверхностных слоях образцов из спектров обратного рассеяния ускоренных ионов, спектров продуктов реакций, спектров ядер отдачи, а также возбуждаемого ускоренным ионным пучком гамма и рентгеновского излучения.

1. M. Mayer et al. Ion beam analysis of fusion plasma-facing materials and components: facilities and research challenges // Nuclear Fusion. 2020. V. 60. № 2. P. 025001.
2. A.M. Dmitriev et al. Re-deposition of ITER-grade Be on plasma gun facility QSPA-Be: Characterization & plasma cleaning // Nuclear Materials and Energy. 2022. V. 30. P. 101111.

Рождение адронов с большими поперечными импульсами в pp столкновениях при энергиях коллайдера NICA

А.В. Зеленов, В.Т. Ким

E-mail: zelenov_av@npri.nrcki.ru

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

Готовящийся в Дубне эксперимент SPD на коллайдере NICA предоставит уникальную возможность изучить вклад многокварковых степеней свободы, таких как дикварки, трикварки, флуктоны и т.д., а также вклад многопартонных взаимодействий в рождение адронов и различных экзотических многокварковых резонансов с большими поперечными импульсами.

Был выполнен расчет сечений рождения каонов, пионов и протонов, а также их отношений на основе фермановской партонной модели [1,2], в которую были добавлены дикварковые подпроцессы [3,4]. Эти расчеты были сравнены с имеющимися данными на ускорителях на Теватроне в FNAL [5] и ИФВЭ в Протвино [6].

Полученные результаты станут основой для параметризации, которая будет внедрена в разрабатываемый в ОФВЭ ПИЯФ основанный на PYTHIA 8 Монте-Карло генератор физических событий ULYSSES [7].

1. Feynman, R. P., Field R. D. and Fox G. C. Correlations among particles and jets produced with large transverse momenta // Nuclear Physics B 128.1 (1977): 1-65.
2. Feynman, R. P., Field R. D. and Fox G. C. Quantum-chromodynamic approach for the large-transverse-momentum production of particles and jets // Physical Review D 18.9 (1978): 3320.
3. Breakstone A. et al. A diquark scattering model for high p_T proton production in pp collisions at the ISR // Zeitschrift für Physik C Particles and Fields 28 (1985): 335-341.
4. Kim V. T. Diquarks and dynamics of large- p_T baryon production // Modern Physics Letters A 3.09 (1988): 909-916.
5. 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 (1979): 764-778.
6. Abramov V. V. et al. Large transverse momentum inclusive hadron production in pp collisions at 70 GeV // Sov. J. Nucl. Phys. 41 (1985): 445-451.
7. 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.

Радиационные распады $K^+ \rightarrow \pi^0 \mu^+ \nu \gamma$ и $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu \gamma$: текущие результаты эксперимента «ОКА»

И.С. Тюрин¹ от имени эксперимента «ОКА»

E-mail: ilia.tiurin@ihep.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт» – Институт физики высоких энергий, Протвино, Россия

Радиационные распады $K^+ \rightarrow \pi^0 \mu^+ \nu \gamma$ ($K_{\mu 3 \gamma}$) и $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu \gamma$ ($K_{e 3 \gamma}$) активно изучаются в последние десятилетия. Интерес к этим распадам обусловлен возможностью поиска в них эффектов Новой Физики, а именно Т-нечетных тройных корреляций. Из СРТ-теоремы следует, что обнаружение таких корреляций эквивалентно нарушению СР-инвариантности, что в физике K -мезонов до наблюдалось только в распадах нейтральных каонов. Помимо этого, оба изучаемых распада позволяют проводить экспериментальную проверку Киральной Теории Возмущений (ChPT), а также лептонной универсальности (путем измерения отношения $\text{Br}(K^+ \rightarrow \pi^0 \mu^+ \nu \gamma) / \text{Br}(K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu \gamma)$).

Измеряемая корреляция $\xi_{\pi \mu \gamma}$ ($\xi_{\pi e \gamma}$) – это смешанное произведение импульсов μ^+ (e^+), π^0 и γ в системе покоя K^+ . Для оценки асимметрии по этой переменной мы используем величину $A_\xi = (N_+ + N_-) / (N_+ - N_-)$, где $N_{+(-)}$ – число событий с $\xi > (<) 0$.

Основной целью данной работы является измерение для обоих изучаемых распадов величины A_ξ , измерение отношения $R_\mu = \text{Br}(K_{\mu 3 \gamma}) / \text{Br}(K_{\mu 3})$ в силу слабой изученности распада $K_{\mu 3 \gamma}$, а также измерение отношения $R_e = \text{Br}(K_{e 3 \gamma}) / \text{Br}(K_{e 3})$.

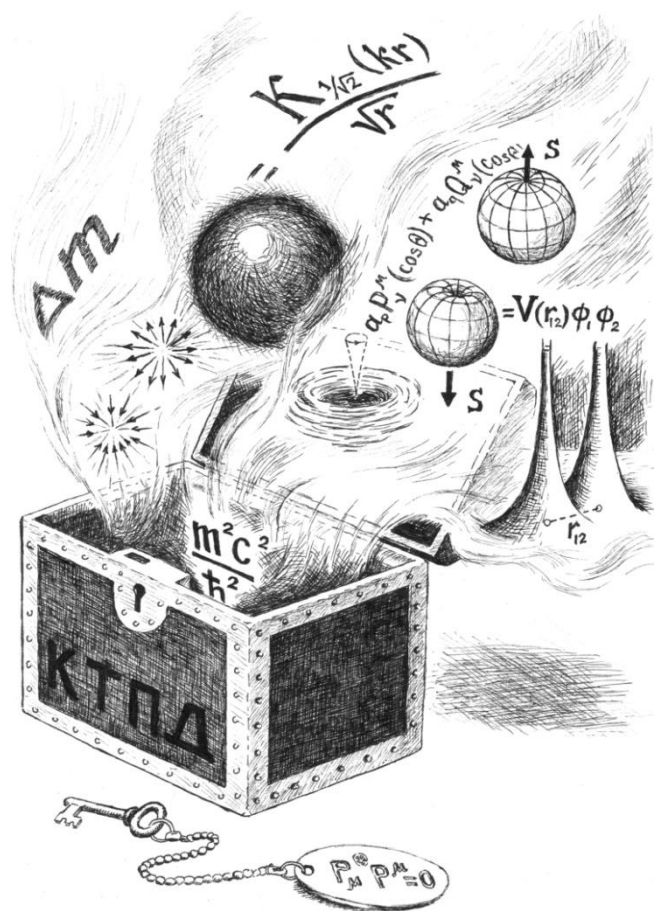
ОКА (от аббревиатуры «Опыты с Каонами») работает с 2010 года и является экспериментом с фиксированной мишенью, предназначенным для изучения распадов каонов. Эксперимент расположен в НИИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино (Россия) и использует протонный синхротрон У-70. Вторичный обогащенный каонами пучок получен при помощи ВЧ-сепарации со схемой Пановского [1]. Пучок содержит в своем составе 12.5% каонов с импульсом 17.7 ГэВ/с и интенсивностью 5×10^5 каонов за 2-секундный сброс ускорителя. Подробную информацию об установке ОКА можно найти в [2].

В результате было получено отношение $R_\mu = (4.45 \pm 0.25 \text{ (стат.)}) \times 10^{-4}$ для $30 < E^* < 60$ МэВ и отношение $R_e = (58.7 \pm 1.0 \text{ (стат.)} \pm 1.5 \text{ (сист.)}) \times 10^{-4}$ для $E^* > 30$ МэВ и $\theta_{e\gamma} > 20^\circ$, где (в системе покоя каона) E^* – энергия фотона, не связанного с π^0 , $\theta_{e\gamma}$ – угол между электроном и фотоном. Было получено значение величины $A_\xi = (-0.6 \pm 6.9 \text{ (стат.)}) \times 10^{-2}$ для $K_{\mu 3 \gamma}$ и $A_\xi = (-0.44 \pm 0.79 \text{ (стат.)} \pm 0.16 \text{ (сист.)}) \times 10^{-2}$ для $K_{e 3 \gamma}$. Используя значение $\text{Br}(K_{\mu 3}) = 3.352\%$ из PDG, $\text{Br}(K_{\mu 3 \gamma}) = (1.492 \pm 0.085 \text{ (стат.)}) \times 10^{-5}$. Расчеты, выполненные в рамках ChPT, предсказывают $\text{Br}(K_{\mu 3 \gamma}) = 1.81 \times 10^{-5}$, $A_\xi = 2.38 \times 10^{-4}$ ($K_{\mu 3 \gamma}$), $A_\xi = -0.93 \times 10^{-4}$ ($K_{e 3 \gamma}$) [3] и $\text{Br}(K_{\mu 3 \gamma}) = 2.15 \times 10^{-5}$, $A_\xi = 1.14 \times 10^{-4}$ ($K_{\mu 3 \gamma}$), $A_\xi = -0.59 \times 10^{-4}$ ($K_{e 3 \gamma}$) [4].

Работа выполнена с поддержкой гранта Российского научного фонда № 22-12-00051

1. A. Ageev et al. // Proceedings of the Particle Accelerator Conference. 2008. P. 282.
2. A. S. Sadovsky et al. Search for heavy neutrino in $K^+ \rightarrow \mu^+ \nu_H$ decay // European Physical Journal C. 2018. V. 78, No. 92.
3. I. B. Khriplovich, A. S. Rudenko // Physics of Atomic Nuclei. 2011. V. 74, P. 1214-1222.
4. V.V. Braguta, A.A. Likhoded, A.E. Chalov // Physical Review D. 2002. V. 65, P. 1868-1876.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА



Изометрические вложения гравитационной pp-волны

Я.А. Федулов, А.А. Шейкин

E-mail: st077222@student.spbu.ru

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

Изометрическое вложение псевдориманова пространства — это описание этого пространства в терминах поверхности в объемлющем пространстве. Эта процедура уже более ста лет используется при изучении решений уравнений Эйнштейна [1], поскольку класс вложения — разность числа измерений вкладываемого и объемлющего пространств — является инвариантной характеристикой пространства. Также изометрические вложения используются при модификации гравитации в т.н. подходе Редже-Тейтельбойма [2].

Поиск вложений пространства с заданной метрикой сводится к решению системы

$$d_m Y^a d_n Y^b h_{ab} = g_{mn}, \quad (1)$$

где Y — функция вложения, h и g — метрики объемлющего и вкладываемого пространств.

В 2012 году С. А. Пастон предложил [3] теоретико-групповой метод разделения переменных в (1). При помощи этого метода были найдены все возможные глобальные минимальные вложения для модели Фридмана, не вращающихся черных дыр (Шварцшильда-(анти) де Ситтера и Райсснера-Нордстрема-(анти) де Ситтера), черной дыры БТЗ и др.

Вложения же метрики гравитационной волны до сих пор изучены весьма плохо. За исключением упоминаний в литературе нескольких частных случаев вложений, систематическое исследование этого вложения, насколько нам известно, было предпринято лишь один раз в работе [4]. Однако автор работы, действуя по методу решения уравнений Гаусса-Кодацци, по-видимому, не ставил целью поиск явного вида вложений, поэтому в работе приведено лишь несколько частных примеров полученных им поверхностей. Кроме того, некоторые возможные типы поверхностей остались неизученными.

Данная работа посвящена систематическому изучению решений (1) для метрики

$$g_{mn} dx^m dx^n = ds^2 = 2 H(u, y, z) du^2 - 2 du dv - dy^2 - dz^2, \quad (2)$$

где H — произвольная функция, поперечный лапласиан которой равен нулю, u и v — координаты светового конуса. Объемлющее пространство выбрано 2+4-мерным, т.к. согласно работам [5] и [6], в 5-мерном или глобально гиперболическом пространстве вложения нет. Анзац для функции вложения Y выбирается так:

$$Y^k = A^k(u) + B^k(u) H(u, y, z) + C^k(u) v, \quad Y^4 = y, \quad Y^5 = z, \quad (3)$$

где A^k , B^k и C^k — неизвестные функции, $k=0, 1, 2, 3$.

Получен явный вид всех поверхностей, функция вложений которых имеет такую форму. Помимо двух классов поверхностей, частные примеры которых описаны в работе [4], получены поверхности нового типа. Функции вложения всех поверхностей содержат различное количество свободных функций от координаты u , что свидетельствует о наличии калибровочного произвола.

Полученные вложения могут быть использованы для анализа гравитационно-волновых решений уравнений Редже-Тейтельбойма.

1. Шмутцер Э. Точные решения уравнений Эйнштейна
2. Sheykin A. A., Paston S. A. The approach to gravity as a theory of embedded surface // AIP Conference Proceedings. 2014. V. 1606. P. 400
3. Paston S. A., Sheykin A. A. Embeddings for Schwarzschild metric: classification and new results // Class. Quant. Grav. 2012. V. 29. P.095022.
4. Collinson, C. D. Embeddings of the Plane-Fronted Waves and Other Space-Times // J. Math. Phys. 1968. V. 9. P. 403.
5. Kasner, E. Geometrical Theorems on Einstein's Cosmological Equations // Am. J. Math. 1921. V. 43. N. 4. p. 217.
6. Penrose, R. A Remarkable Property of Plane Waves in General Relativity // Rev. Mod. Phys. 1965. V. 37. P. 215.

Neural-network-based fitting of full-dimensional two-body potential energy and dipole moment surfaces aimed at spectral simulations

A.A. Finenko^{1,2,3}, D.N. Chistikov^{1,2,3}

Email: a.finenko@ipfran.ru

¹Department of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, GSP-1, 1-3 Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia

²Federal Research Center A.V. Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences, 46 Ulyanov Street, Nizhny Novgorod, 603950, Russia

³Institute of Quantum Physics, Irkutsk National Research Technical University, 83 Lermontov str., Irkutsk 664074, Russia

High-level quantum chemical potential energy surfaces (PESs) and dipole moment surfaces (DMSs) are indispensable for accurately simulating molecular spectra. Representing a global multidimensional PES or DMS based on the array of preselected *ab initio* points across the configuration space poses a difficult challenge. Machine learning, and neural networks in particular, have shown great promise for building flexible and computationally efficient models [1, 2].

In the current study, we undertake the development of machine-learned PESs and DMSs for weakly bounded complexes for simulating the thermophysical and spectral properties of atmospheric gases. A recently suggested permutationally invariant neural network (PIP-NN) approach [3] is refined and extended to represent the full-dimensional two-body components of the molecular pair energy and dipole. To ensure the asymptotic zero-interaction limit, as well as to accurately represent the long-range behavior, a tailored subset of the polynomial basis set is utilized. The suggested technique is showcased by fitting databases of N₂-Ar and N₂-CH₄ interaction energies and N₂-Ar induced dipoles calculated using CCSD(T)/CCSD(T)-F12 methods. The second virial coefficient, fully accounting for molecular flexibility, is calculated within the classical framework. A first-principle trajectory-based simulation [4] of the N₂-Ar collision-induced absorption is then conducted both in the far- and mid-infrared ranges using the constructed PIP-NN PES and DMS.

This work is supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-17-00041)

1. Unke O. T., Meuwly M. PhysNet: A neural network for predicting energies, forces, dipole moments, and partial charges // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2019. V. 15. No. 6. P. 3678-3693.
2. Li Y., Zhai Y., Li H. MLRNet: Combining the physics-motivated potential models with neural networks for intermolecular potential energy surface construction // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2023. V. 19. No. 5. P. 1421-1431.
3. Jiang B., Guo H. Permutation invariant polynomial neural network approach to fitting potential energy surfaces // *Journal of Chemical Physics*. 2013. Vol. 139. No. 5. P. 054112-1 - 054112-5.
4. Chistikov D. N. et al. Simulation of collision-induced absorption spectra based on classical trajectories and *ab initio* potential and induced dipole surfaces. II. CO₂-Ar rototranslational band including true dimer contribution // *Journal of Chemical Physics*. 2021. Vol. 155. No. 6. P. 064301-1 - 064301-17.

М. В. Красков¹, А. А. Шейкин¹

E-mail: st086760@student.spbu.ru

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

Подход Редже-Тейтельбойма (РТ), также известный как теория вложения — это подход к описанию гравитации, в которой изучаемое пространство-время трактуется как поверхность в плоском объемлющем пространстве большего числа измерений. Данный подход используется для модификации гравитации, в частности, с целью поиска эффектов темной материи [1]

Теоретико-полевая переформулировка подхода РТ была предложена С. А. Пастоном в 2010 году [2] и получила название «теория разбиения». В этой формулировке искомая поверхность задается как поверхность постоянных значений набора скалярных полей. Данная теория позволяет обойтись без введения ненаблюдаемых координат на поверхностях и обладает большим сходством с теорией поля, чем обычная геометрическая формулировка, а также обладает потенциальными преимуществами при квантовании [3].

В теории разбиения имеются преобразования симметрии, аналогичные диффеоморфизмам в обычной ОТО: преобразования перенумерации поверхностей, задаваемых набором скалярных полей. В 2017 году был исследован вопрос о скалярах по отношению к таким преобразованиям. Было установлено, что простейших скаляров имеется пять, один из которых аналогичен скалярной кривизне в ОТО [4].

В данной работе изучаются уравнения движения, соответствующие действию, выбранному в виде произвольной линейной комбинации этих скаляров с дополнительной весовой функцией, зависящей от определителя «метрики» в подпространстве, ортогональном поверхностям (аналог корня из определителя метрики в действии Эйнштейна-Гильберта).

Получены уравнения движения, соответствующие такому действию. Установлено, что в общем случае наличие каких-либо скаляров, кроме аналога скалярной кривизны, и какого-либо весового множителя, кроме корня из определителя «метрики» ортогонального подпространства приводит к неустраняемому присутствию в уравнениях движения производных выше вторых. Это отвечает на вопрос о том, почему в теории поля, изначально не имеющей отношения к общей теории относительности и ее расширениям, необходимо использовать аналог действия Эйнштейна-Гильберта (как предлагалось в [2]).

В случае 1+1-мерной поверхности, изометрически вложенной в 2+1-мерное пространство, ситуация становится более интересной. Расчеты показывают, что весовой множитель при скаляре Эйнштейна-Гильберта может содержать по крайней мере произвольную степень определителя «метрики» без появления высших производных. Действие при этом приобретает вид, аналогичный двумерной скалярно-тензорной гравитации с дополнительными ограничениями.

В дальнейшем планируется провести анализ частных решений полученных уравнений, возможно, с дополнительным наложением той или иной физически интересной симметрии на изучаемые поверхности.

1. Paston S. A., Sheykin A. A. Embedding theory as new geometrical mimetic gravity // Eur. Phys. J. C. 2018. V. 78 P. 989.
2. Paston S. A. Gravity as a field theory in flat space-time // Theor. Math. Phys. 2011. V. 169. N. 2. P. 1600.
3. Paston S. A., Semenova E. N., Sheykin A. A. Canonical description for formulation of embedding gravity as a field theory in a flat spacetime // Symmetry. 2020. V. 12. N. 5. P. 722.
4. Sheykin A. A., Paston S. A. Field-Theoretical Formulation of Regge-Teitelboim Gravity // Phys. At. Nucl. 2016. V. 79, N. 11-12. P. 1494.

Эффекты несохранения четности в молекуле $^{173}\text{YbOH}$ *И.П. Курчавов¹, А.Н. Петров^{1,2}*

E-mail: kurchavov_ip@npri.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона и магнитных квадрупольных моментов (МКМ) ядер с использованием охлаждаемых лазером трехатомных соединений, таких как YbOH , является одним из самых чувствительных проб для физики за пределами стандартной модели.

Сдвиг энергии, вызванный ЭДМ электрона, пропорционален степени поляризации (P_e) молекулы. По аналогии с двухатомными молекулами со структурой Ω -дублетов предполагалось, что для трехатомных молекул со структурой 1-удвоения, связанной с колебательным угловым моментом, P_e может легко насыщаться почти до 100% при умеренном внешнем электрическом поле. В статье [1] был разработан метод расчета свойств трехатомных молекул, и он был применен к вычислениям P_e для $^{174}\text{YbOH}$ в первом возбужденном состоянии $\nu = 1$ деформационной моды. Результаты показали, что большинство уровней достигают эффективности менее 50%, что связано с особенностями молекул со случаем связи по Гунду типа (b).

В данной работе [2] метод был расширен на случай константы P_M – степени поляризации (коэффициент пропорциональности) для сдвига энергии молекулы вызванного МКМ ядра. Метод применен для расчета $^{173}\text{YbOH}$ с изотопом иттербия со спином $I=5/2$ [2]. Отметим, что МКМ может возникнуть только у ядер со спином $I > 1/2$ и также связан с важными параметрами физики элементарных частиц, такими как ЭДМ протона и нейтрона, кваркхромЭДМ и θ -член в КХД [3].

Рассчитанные значения P_e и P_M для $^{173}\text{YbOH}$ [2] как функции внешнего электрического поля позволят разделить вклады от ЭДМ электрона и МКМ в сдвигах уровней молекулы и извлечь соответствующие величины из эксперимента. Из результатов, как и прежде, видно, что факторы поляризации P_e для линейных трехатомных молекул, относящихся к случаю связи по Гунду типа (b), не достигают единичного (100%) значения. Оказалось, что все уровни для $^{173}\text{YbOH}$ имеют степени поляризации $P_e < 0.65$ и $P_M < 0.15$. Полученные данные могут быть использованы для планирования экспериментов по поиску T, P-нарушающих эффектов с помощью молекулы YbOH .

1. A. Petrov, A. Zakharova Sensitivity of the YbOH molecule to PT -odd effects in an external electric field // PRA 105, L050801 (2022)
2. I. Kurchavov, A. Petrov P, T-odd energy shifts of the $^{173}\text{YbOH}$ molecule // Phys. Rev. A 106, 062806
3. L. V. Skripnikov, A. N. Petrov, A. V. Titov, and V. V. Flambaum CP-Violating Effect of the Th Nuclear Magnetic Quadrupole Moment: Accurate Many-Body Study of ThO // Phys. Rev. Lett. 113, 263006

**Резонансная зависимость дробового шума от магнитного потока
в геликоидальных состояниях**

Р.А. Ниязов¹, Д.Н. Аристов^{1,2}, В.Ю. Качоровский²

E-mail: niyazov_ra@npri.nrcki.ru

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

²*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

В последнее время большое внимание уделяется исследованию двумерных топологических изоляторов [1]. В объеме они являются изоляторами, но на краях могут содержать проводящие геликоидальные электронные состояния. Благодаря этому двумерные топологические изоляторы естественным образом представляют собой квантовые электронные интерферометры, если к ним присоединены металлические электроды. При этом рассеяние электронов в точках контакта отсутствует, а обратное рассеяние происходит только при наличии магнитного дефекта на краю образца.

Наблюдаемыми в таких системах можно управлять за счет эффекта Ааронова-Бома: они периодически зависят от магнитного потока, пронизывающего область, охваченную электронными состояниями. Ранее был изучен кондактанс геликоидального интерферометра [2]. В то же время, есть еще одна наблюдаемая величина – дробовой шум.

В данной работе изучается дробовой шум интерферометров Ааронова-Бома на основе геликоидальных состояний. Показано, что при полужелтых значениях магнитного потока возникают резонансы. Их характер зависит от силы туннелирования электронов из электродов в интерферометр: при слабом туннелировании дробовой шум уменьшается, при сильном – увеличивается. При этом относительная длина плеч и положение магнитной примеси не влияет на интерференцию.

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

1. Culcer D., Cem Keser A., Li Y., Tkachov G. // 2D materials. 2020. V. 7. P. 022007

2. Niyazov R.A., Aristov D.N., Kachorovskii V.Yu. // JETP Letters. 2021. V. 113. P. 689-700

Применение ортогональных полиномов Якоби для исследования спектральных свойств линейных систем

И.О. Райков¹, Я.М. Бельтюков¹

E-mail: IORaikov@gmail.com

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

В физике часто встречаются задачи, сводящиеся к исследованию линейных систем. К таким задачам относится, в частности, поиск собственных состояний квантовых систем или собственных мод малых колебаний атомов. Стандартный подход к таким задачам заключается в диагонализации соответствующих матриц и получении их собственных значений, однако зачастую такие системы обладают большим числом степеней свободы, что требует значительных вычислительных ресурсов. Однако существует метод, получивший название Kernel Polynomial Method (KPM) и позволяющий определять плотность состояний, функцию Грина и другие наиболее значимые физические характеристики в виде разложения по ортогональным полиномам, не прибегая к поиску отдельных собственных значений и собственных векторов [1]. Такой метод позволяет анализировать системы с миллионами степеней свобод без использования суперкомпьютеров, и приобрёл широкое применение в последнее время, в том числе для анализа многослойных аперидических двумерных систем [2] и одномерного квантового транспорта [3].

Основным подходом в данном методе является применение полиномов Чебышева первого рода $T_n(x)$. Такие полиномы позволяют использовать свойства преобразования Фурье для нахождения наилучшей полиномиальной аппроксимации. Однако такая аппроксимация имеет корневую расходимость вблизи краёв исследуемого спектрального диапазона. Для ряда систем такое поведение может вносить существенное искажение исследуемых физических свойств. Например, при исследовании фононных систем длинноволновые акустические фононы имеют степенную плотность колебательных состояний, степень которой зависит от размерности пространства. В данной работе описывается реализация KPM, основанная на более широком семействе ортогональных полиномов Якоби $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$, позволяющая находить полиномиальную аппроксимацию с произвольной степенной зависимостью на краях спектрального диапазона.

Используя свойства полиномов Якоби [4-5] и известные результаты о задаче Чебышева [5-6], были определены оптимальные с точки зрения спектрального разрешения коэффициенты затухания (применяющиеся для гашения осцилляций Гиббса) для чётного и нечётного порядков аппроксимации. Исследованы асимптотическое поведение коэффициентов затухания и точности аппроксимации, и приведены примеры получающихся ядер для конкретных значений α и β , а также примеры аппроксимации для конкретных систем. Разработанный метод применен для анализа низкочастотных колебательных возбуждений в аморфном кремнии и других неупорядоченных системах.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-72-10083

1. Weisse A. [и др.]. The Kernel Polynomial Method // Reviews of Modern Physics. 2006. № 1 (78). С. 275–306.
2. Carr S. [и др.]. Twistrionics: Manipulating the electronic properties of two-dimensional layered structures through their twist angle // Physical Review B. 2017. № 7 (95). С. 075420.
3. Bertini B. [и др.]. Finite-temperature transport in one-dimensional quantum lattice models // Reviews of Modern Physics. 2021. № 2 (93). С. 025003.
4. Gasper G. Banach Algebras for Jacobi Series and Positivity of a Kernel // The Annals of Mathematics. 1972. № 2 (95). С. 261.
5. Szegö G. Orthogonal polynomials / G. Szegö, American Mathematical Soc., 1939.
6. Иванов В. И. Задача Чебышева об экстремальных значениях моментов неотрицательных алгебраических многочленов // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2020. № 4 (26). С. 138–154.

Исследование возможности неквантового понимания излучения Хокинга

Д.С. Шатков¹, С.А. Пастон¹

E-mail: ya.danilishe@yandex.ru

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

Излучение Хокинга впервые было описано в статье [1] и более подробно рассмотрено в других работах, например, [2]. Данный подход предполагает описание излучения черных дыр в рамках квантовой теории поля, рассматривая задачу об S — матрице.

В работе рассматривается возможность описания излучения Хокинга в рамках классической теории поля. Строится решение уравнения Даламбера для безмассового скалярного поля в метрике коллапсирующей тонкой пылевидной оболочки в отсутствие сходящихся сферических волн.

В результате построена система координат, не претерпевающая разрыв на пылевидной оболочке. Задача решения уравнения Даламбера в новой метрике сведена к сшиванию известных решений в метриках Лоренца и Шварцшильда на коллапсирующей оболочке. Получено уравнение, описывающее излучение Хокинга, а также проанализированы подходы к его решению.

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

1. Stephen W. Hawking, Black hole explosions?, Nature, 248: 5443 (1974), 3031.
2. Гриб А. А., Мамаев С. Г., Мостепаненко В. М. Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Энергоатомиздат, 1988.—288 с.

Модельнонезависимый способ определения ядерных радиусов

Д.С. Акүлов, А.В. Володка

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

Федеральное государственное

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

Величина среднеквадратичного зарядового ядерного радиуса является одной из важнейших характеристик атомов. Помимо важности знания значения радиуса с точки зрения фундаментальной науки, величина зарядового ядерного радиуса является основным источником погрешности при расчете значений таких поправок, как поправка на эффект конечного размера ядра, а также эффекты ядерной поляризации и ядерной деформации. Знание этих эффектов с наибольшей точностью позволит проверить квантовую электродинамику (КЭД) [1].

Существует три основных экспериментальных источника из которых может быть определено значение среднеквадратичного зарядового ядерного радиуса: оптическая спектроскопия, эксперименты с мюонными атомами и упругое рассеяние электронов. Методы оптической спектроскопии применяются к изотопическому сдвигу, что позволяет, вычислив массовый сдвиг и сдвиг по полю для двух изотопов определить значение среднеквадратичного ядерного зарядового радиуса. В экспериментах с мюонными атомами определяется величина Барретовского радиуса [2], величина, связанная со среднеквадратичным ядерным радиусом аналитическим соотношением, что позволяет непосредственно его извлечь.

Значительную роль в определении ядерных параметров играет рассматриваемая ядерная модель. Широко распространена модель Ферми, зависящая от двух параметров: радиус, соответствующий половине плотности и толщина скин слоя. Как правило, значение толщины скин слоя принимается равным 2.3 фм.

В настоящей работе предложен комбинированный метод извлечения среднеквадратичного ядерного зарядового радиуса: первым шагом, по известному значению Барретовского радиуса с учетом погрешности восстанавливаются пары значений среднеквадратичного радиуса и толщины скин слоя в диапазоне от 1.8 фм, воспроизводящих данное значение; вторым источником является значение сдвига по полю в изотопическом сдвиге. Перебирая пары допустимых значений радиуса и толщины скин слоя, воспроизводящих необходимое значение сдвига по полю. Таким образом, сопоставляя результат двух экспериментов, среднеквадратичный ядерный радиус может быть определен независимо из двух источников.

В настоящей работе предложенный метод применен к расчетам для изотопов неодима с массовыми числами $A = 142$ и $A=150$. Полученная разность радиусов отличается от представленной в атомных таблицах [3], что дает основания для проведения дополнительных исследований.

1. A. Volotka, G. Plunien, Nuclear polarization study: New frontiers for tests of QED in heavy highly charged ions
2. G. Fricke, K. Heilig, Nuclear Charge Radii, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology Group I: Elementary Particles, Nuclei and Atoms, Volume 20
3. I. Angeli, K.P. Marinova, Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2012

**Энергетические спектры легких одно-электронных квазимолекул вещества-
антивещества в рамках метода А-ДКБ**

А.А. Аникин^{1,2}, А.А. Данилов¹, Д.А. Глазов^{1,3}, А.А. Котов¹, Д.А. Соловьев^{1,4}

E-mail: alexey.anikin.spbu@gmail.com

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

²Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии имени Д.И. Менделеева Санкт-Петербург, Россия

³Физико-технический мегафакультет, национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

⁴Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Прецизионная молекулярная спектроскопия охватывает широкий спектр задач современной физики и служит инструментом для определения значений фундаментальных физических констант, таких как, например, отношение масс протона к электрону или зарядовый радиус протона [1], построения оптических часов, тестирования фундаментальных взаимодействий [2].

За последние десятилетия были успешно реализованы прецизионные исследования молекулярных систем, содержащих антипротон [3]. Исследование систем с античастицами имеет особую важность ввиду возможности прямой проверки СРТ-инвариантности путем сравнения спектров вещества и антивещества [4]. Успешные эксперименты по двухфотонной спектроскопии антипротонного гелия [5] стимулировали теоретические расчёты чрезвычайно малых эффектов, что позволяет точно определять частоты переходов [6]. Продолжающееся развитие экспериментальной техники по синтезу атомов антиводорода [7] делает возможным прецизионное экспериментальное определение энергий переходов Лаймана- α , сверхтонких и т.д. в антиатомах [8].

Будучи задачей многих тел, теоретическое описание одноэлектронных квазимолекул проводится с использованием численных методов. Одним из наиболее широко используемых является решение нерелятивистской двухцентровой задачи и использование нерелятивистской квантовой электродинамики (NRQED) для получения релятивистских поправок [6]. Другой подход к решению одноэлектронной задачи для двухъядерной квазимолекулы - решать уравнение Дирака с двухцентровым кулоновским потенциалом. В рамках такого подхода используются различные разложения волновых функций, к примеру, по парциальным волнам и разложение Дирака-Штурма [9]. В данной работе используется разложение по конечному базисному набору В-сплайнов, обобщенных на осесимметричные системы (А-ДКБ) [10]. С помощью этого метода получены энергетические спектры антипротон-гелиевых и протон-антипротонных ионов.

Работа была поддержана Российским Научным Фондом (грант номер 23-22-00250)

1. Karr J.-P. et al. // Phys. Rev. A, vol. 94, p. 050501, 2016.
2. Schiller S. et al. // Phys. Rev. Lett., vol. 113, p. 023004, 2014.
3. Doser M. // Progress in Particle and Nuclear Physics, p. 103964, 2022.
4. Myers E. G. // Phys. Rev. A, vol. 98, p. 010101, 2018.
5. Hori M. et al. // Nature, vol. 475, no. 7357, pp. 484–488, 2011.
6. Korobov V. I. // Phys. Rev. A, vol. 77, p. 042506, 2008.
7. Baur G. et.al. // Phys. Lett. B 368, 251, 1996.
8. Ahmadi M. et al. // Nature, vol. 548, pp. 66–69, 2017.
9. Tupitsyn I. I. et al. // Phys. Rev. A 82, 042701, 2010.
10. Rozenbaum E. B. et al. // Phys. Rev. A 89, 012514, 2014.

Интегрируемые уравнения Ландау-Лифшица и теоретико-полевые обобщения систем частиц

К.Р. Аталиков

E-mail: kantemir.atalikov@yandex.ru

Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт" - ККТЭФ г. Москва, Россия

Интегрируемые системы – это особый класс дифференциальных и разностных уравнений, обладающих либо явными решениями, либо симметриями более сложной природы. Одним из примеров интегрируемых систем является модель Калоджеро-Мозера.

Изучается в работе 1+1-полевое обобщение тригонометрической модели Калоджеро-Мозера с N частицами. Данная модель калибровочно эквивалентна некоторому специальному матричному уравнению Ландау-Лифшица старшего ранга. Последнее уравнение описывается в терминах тригонометрической R -матрицы $GL(N)$, которая в случае $N = 2$ превращается в 7-вершинную R -матрицу [1]. Тригонометрическая R -матрица удовлетворяет ассоциативному уравнению Янга-Бакстера, лежащему в основе построения пары Лакса. Предложен полевой аналог преобразования IRF-Vertex (подобно рациональному случаю [2]), который позволяет вычислить явную замену переменных между полевой моделью Калоджеро-Мозера и уравнением Ландау-Лифшица.

1. T. Krasnov, A. Zotov, *Trigonometric integrable tops from solutions of associative Yang-Baxter equation*, *Annales Henri Poincaré*, 20:8 (2019) 2671–2697; arXiv:1812.04209 [math-ph].
2. K. Atalikov, A. Zotov, *Gauge equivalence between 1+1 rational Calogero-Moser field theory and higher rank Landau-Lifshitz equation*, arXiv:2303.08020 [hep-th].

Применение теории коррелированных случайных матриц для изучения квазилокальных колебаний в аморфных телах

Д.В. Бабин^{1,2}, Д.А. Конюх¹, Я.М. Бельтюков¹

E-mail: babin.2002@bk.ru

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Микроскопическая структура и природа аморфного состояния вещества в настоящее время является предметом интенсивных исследований, в первую очередь с теоретической точки зрения. Аморфные твердые тела отличаются от кристаллов наличием беспорядка в расположении атомов, что приводит к ряду существенных отличий в их свойствах, в том числе колебательных. Однако, общепринятая теория низкочастотных колебательных возбуждений в аморфных материалах по-прежнему отсутствует. Одним из низкочастотных типов колебательных возбуждений являются так называемые квазилокальные колебания. Это долгоживущие колебания аномально мягких участков аморфных сред, то есть группы атомов, слабо связанных со своим окружением. Они определяют основной вклад в рассеяние акустических фононов и дают существенный вклад в бозонный пик [1].

Количество квазилокальных колебаний в стеклах зависит от процессов охлаждения, влияющих на образование в структуре стекол аномально мягких участков. Каждый мягкий участок имеет свою характерную частоту, что ведет к распределению частот квазилокальных колебаний. Исследования сильно переохлажденных модельных стекол показывают, что плотность квазилокальных состояний $\rho_{qlv}(\omega) \propto \omega^\gamma$, где $\gamma \approx 4$ для большинства исследованных систем, независимо от скорости и протоколов охлаждения [2]. При этом охлажденная система приходит к метастабильному положению равновесия, которое обладает существенной корреляцией упругих констант связей. Такой коррелированный беспорядок может влиять на структурные свойства квазилокальных колебаний. Однако на сегодняшний день выявление связи квазилокальных колебаний и коррелированного беспорядка в неупорядоченных системах является малоизученным вопросом, в том числе с теоретической точки зрения.

Для изучения поставленного вопроса нами была применена теория коррелированных случайных матриц, показавшая свою эффективность для описания критерия Иоффе-Регеля и других наиболее общих колебательных свойств аморфных твердых тел [3, 4]. Колебания вблизи устойчивого положения равновесия описываются динамической матрицей M , и в случае сильного беспорядка, присущего аморфным телам, статистические свойства динамической матрицы наилучшим образом описываются коррелированным ансамблем Вишарта $M = AA^T$. Результаты наших исследований показывают, что квазилокальная мода состоит из диффузионного ядра и упругого диполя на больших расстояниях. При этом масштаб диффузионного ядра сопоставим с масштабом неоднородности, проявляющимся в аморфных веществах и связанный с масштабом Иоффе-Регеля. Результаты, полученные с помощью теории случайных матриц, согласуются с результатами проведенных молекулярно-динамических расчетов для разных аморфных структур и протоколов их охлаждения.

Работа выполнена при поддержке гранта Совета по грантам Президента Российской Федерации № МК-1893.2022.1.2

1. Gurevich V.L., Parshin D.A., Schober H.R. Anharmonicity, vibrational instability, and the Boson peak in glasses // Phys. Rev. B. 2003 V. 67. No 9. P. 094203-1 — 094203-10.
2. H. Mizuno, H. Shiba, A. Ikeda. Continuum limit of the vibrational properties of amorphous solids // Proc. Natl. Acad. Sci. 2017. V. 114. No 46. P. E9767-E9774.
3. Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin. Ioffe-Regel criterion and diffusion of vibrations in random lattices // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. No. 13. P. 134203.
4. D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Random matrix approach to the boson peak and Ioffe-Regel criterion in amorphous solids // Phys. Rev. B. 2021. V. 103. No. 10. P. 104204.

**Вычисление критической размерности вязкости
вблизи точки фазового перехода в сверхтекучее состояние**

Д. А. Давлетбаева¹, М. Гнатич², Л. Мижишин², М. Ю. Налимов^{1, 2}

E-mail: st064737@student.spbu.ru

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

²Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Исследование критических свойств вещества при фазовом переходе в сверхтекучее состояние ведётся с первой половины двадцатого века и до сегодняшнего дня остается важной задачей теоретической физики. В работе [1] была построена микроскопическая модель бозе-флюида, совершающего фазовый переход второго рода в сверхтекучее состояние, а также было показано, что вблизи критической точки система может быть эффективно описана двухкомпонентной моделью А стохастической динамики [2, 3]. Известно, что при данном фазовом переходе вязкость обращается в нуль. Этот процесс может быть описан критической размерностью вязкости, целью данной работы является её вычисление.

В работе был проведен анализ, в ходе которого оказалось, что критическая размерность вязкости может быть вычислена с помощью метода составных операторов. В ходе работы было показано, что она определяется наиболее существенной критической размерностью семейства составных операторов канонической размерности 8. Также необходимо исследовать критические размерности семейств составных операторов канонических размерностей 6, 4, 2, так как при ренормировке они примешиваются к составным оператором канонической размерности 8, недостающая размерность компенсируется степенями управляющего параметра фазового перехода – параметра τ динамической модели А, в данной задаче соответствующего химическому потенциалу системы.

В результате работы были вычислены критические размерности семейства составных операторов канонических размерностей 2–8 [4], была получена критическая размерность вязкости в однопетлевом приближении, она есть $(-2 + 11.8\varepsilon)$ для наиболее ИК-существенного составного оператора, в трёхмерном пространстве $\varepsilon = 1$.

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

1. Zhavoronkov Y.A., Komarova M.V., Molotkov Y.G., Nalimov M.Yu., Honkonen J. Critical Dynamics of the Phase Transition to the Superfluid State // Theoretical and Mathematical Physics. 2019. V. 200. P. 1237–1251.
2. Васильев А. Н., Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. Санкт-Петербург: Издательство Петербургского института ядерной физики (ПИЯФ), 1998. 773 с.
3. Hohenberg P.C., Halperin B.I. Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Mod. Phys. 1977. V. 49. P. 435–479.
4. Давлетбаева Д. А., Гнатич М., Комарова М. В., Лучивянски Т., Мижишин Л., Налимов М. Ю. Составные операторы стохастической модели А // Теоретическая и математическая физика. 2023. Т. 216, № 3. С. 519–531.

Н.В. Филина, С.С. Батури

E-mail: nvfilina@bk.ru

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

Построение теории движения закрученных квантовых пакетов в электромагнитных полях ускорителя частиц является важным шагом к разработке высоко энергического источника одиночных закрученных частиц и исследования их свойств в области высоких энергий. Основными приложениями частиц с подобными свойствами могут являться диагностика и микроскопия нано-материалов, исследование нетривиальных поверхностей с нано-особенностями, анализ биологических молекул, квантовая информатика, а также фундаментальная физика высоких энергий.

В данной работе представляется теоретическое описание движения закрученного электрона вдоль оси z в сонаправленном переменном во времени магнитном поле. Частица рассматривается в виде волнового пакета локализованного вдоль оси распространения, что обеспечивает выполнение соотношения $z=ct$. Таким образом, задача рассматривается в 2D.

Гамильтониан поперечного движения представляет собой гамильтониан симметричного двумерного гармонического осциллятора со связью пропорциональной z -проекции момента импульса $L_z = \hbar x_y - \hbar y_x$. В случае отсутствия изменений магнитного поля во времени решения такой задачи хорошо известны – это стационарные уровни Ландау. Существуют также явно полученные решения нестационарной задачи [1].

Интересным является геометрический подход к нахождению решений нестационарной задачи по известным стационарным решениям на основе теории дифференциальных уравнений В.И. Арнольда, а именно теореме о выпрямлении фазовых траекторий. Она гласит о существовании эквивалентности описаний свободной частицы и одномерного осциллятора [2]. Идея получила развитие в работе группы из Испании [3], которая осуществила переход от классического случая к одномерному квантовому. Они также связали системы осцилляторов с разными частотами между собой посредством композиции преобразований через систему со свободной частицей.

Мы предлагаем дальнейшее обобщение на двумерный случай со связью пропорциональной L_z [4]. Отображение, осуществляющее эквивалентность, по своей сути представляет собой симметричную замену координат, замену времени, а также добавление фазы к волновой функции отображаемой системы. Интересно, что преобразование параметризуется лишь одной функцией $b(t)$, которая является решением уравнения Ермакова-Пинни — обыкновенного полностью интегрируемого нелинейного дифференциального уравнения второго порядка. Данный параметр имеет смысл дисперсии волнового пакета в процессе эволюции начального закрученного состояния.

Описанный метод позволяет получить из стационарных нестационарные состояния Ландау путём отображения системы на себя, легко учесть линейное трение в системе. Он может быть использован в дальнейшем для получения нестационарных решений более сложных систем.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда и Санкт-Петербургского научного фонда, проект № 22-22-20062, <https://rscf.ru/project/22-22-20062/>

1. L. Zou, P. Zhang, and A. J. Silenko, “General quantum-mechanical solution for twisted electrons in a uniform magnetic field”, *Phys. Rev. A*, vol. 103, p. L010201, Jan 2021.
2. V. I. Arnold, “Ordinary Differential Equations” (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
3. F. F. Lopez-Ruiz and J. Guerrero, “Generalizations of the Ermakov system through the quantum Arnold transformation”, *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 538, p. 012015, Oct 2014.
4. N. V. Filina and S. S. Baturin, “Unitary equivalence of twisted quantum states,” *Phys. Rev. A*, vol. 108, p. 012219, Jul 2023.

**Теоретическое исследование электронной структуры молекул молекул,
содержащих лантаноиды**

П.А. Хадеева¹, В.М. Шахова¹, Ю.В. Ломачук¹, Н.С. Мосягин¹, А.В. Титов¹

E-mail: poliakhadeyeva@gmail.com

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

Химические соединения, содержащие в своем составе f- и d-элементы, обладают рядом исключительных свойств, из-за которых они представляют широкий практический интерес. Однако теоретическое исследование их электронной структуры связано с рядом трудностей. Как правило, расчеты требуют одновременного учета релятивистских и корреляционных эффектов на самом высоком уровне. Связано это с тем, что поливалентные тяжелые d- и f-элементы часто имеют ярко выраженный мультиконфигурационный характер и высокую плотность низколежащих электронных состояний, для корректного описания которых требуется очень высокая точность.

Объектами исследования выбраны молекулы YbHal_n ($\text{Hal} = \text{F}, \text{Cl}, n = 2, 3$). Атом иттербия находится в двух разных валентных состояниях: +2 и +3. В первом случае 4f-оболочка полностью закрыта, а во втором – открыта.

Для проведения теоретического исследования данных молекул, в работе был использован метод релятивистского псевдопотенциала остова, который позволяет кардинально сократить вычислительные затраты путем уменьшения числа электронов, явно участвующих в расчете. На следующем этапе исследования проводится восстановление волновых функций в области ядра [1] для вычисления различных свойств, сконцентрированных в остоковой области тяжелого атома.

В качестве критерия проверки корректности воспроизведения электронной плотности был выбран химический сдвиг (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС) атома [2]. Данное свойство является характеристическим для каждого атома, а также обладает высокой чувствительностью к изменениям электронной структуры в остове.

Для данных молекул были вычислены структурные параметры, а именно длины связей Yb-Hal и углы между Hal-Yb-Hal . Также проведен расчет химических сдвигов линий $K_{\alpha 1}$ и $K_{\alpha 2}$ – линий РЭС в молекуле YbHal_3 относительно молекулы YbHal_2 и изучена зависимость значения ХС от размера базисного набора на галогене.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 20-13-00225

1. Titov A.V. et al. Recent advances in the theory of chemical and physical systems // Springer, Dordrecht. 2006. С. 253-283.
2. Lomachuk Y.V., Titov A.V. Method for evaluating chemical shifts of x-ray emission lines in molecules and solids// PRA. 2013. V. 88, 6. p. 062511.

Влияние временной задержки между компонентами двухчастотного циркулярно-поляризованного лазерного импульса на генерацию гармоник в молекуле H_2^+

Н.В. Князев¹, Д.А. Тельнов²

E-mail: koliasik1997@gmail.com

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

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

Генерация гармоник высокого порядка является фундаментальным процессом в сильном лазерном поле с участием атомов, молекул или твёрдых тел, который привлекает к себе большое внимание в связи с возможным применением в науке и технике [1].

Мы рассматривали генерацию гармоник молекулярным ионом H_2^+ в основном электронном состоянии под действием двухчастотного лазерного импульса с циркулярно-поляризованными компонентами (длины волн 800 нм и 400 нм), имеющими противоположное направление вращения вектора поляризации. Обе компоненты поляризованы циркулярно в плоскости x-y, имеют одну и ту же форму огибающей (\sin^2) и одинаковую длительность (10 периодов излучения с длиной волны 800 нм). Ось молекулы ориентирована вдоль оси z, то есть, перпендикулярно плоскости поляризации лазерного поля.

Для решения нестационарного уравнения Шрёдингера нами был использован обобщённый псевдоспектральный метод в сфероидальных координатах [2]. Для эффективного развития волновой функции во времени был применён метод сплит-оператора в энергетическом представлении [3].

Нами были рассчитаны спектры генерации гармоник в зависимости от соотношения интенсивности компонент и временной задержки между ними. В результате была выявлена отчётливая дублетная структура пиков для гармоник низкого порядка, объясняемая правилами отбора. Было выявлено, что самый сильный сигнал во всех частях спектра наблюдается при полном перекрытии компонент, когда временная задержка между компонентами отсутствует. Также были получены значения полной энергии излучения в области подпороговых гармоник, в области плато и в области отсечки спектра. При отрицательной задержке (компонента 400 нм начинается раньше, чем компонента 800 нм) уровень сигнала меньше, чем при положительной задержке с той же самой абсолютной величиной как в низкочастотной части спектра, так и в области плато (если интенсивность компоненты 400 нм достаточно высокая). Противоположная картина наблюдается в области отсечки.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-02-00199

1. Krausz F., Ivanov M. Attosecond physics //Reviews of modern physics. 2009. Т. 81. №. 1. С. 163.
2. Telnov D. A. et al. Effects of multiple electronic shells on strong-field multiphoton ionization and high-order harmonic generation of diatomic molecules with arbitrary orientation: An all-electron time-dependent density-functional approach //Physical Review A. 2009. Т. 80. №. 4. С. 043412.
3. Tong X. M., Chu S. I. Theoretical study of multiple high-order harmonic generation by intense ultrashort pulsed laser fields: A new generalized pseudospectral time-dependent method //Chemical Physics. 1997. Т. 217. №. 2-3. С. 119-130.

Применимость различных квантохимических подходов для реакции взаимодействия циклогексанона с фенилацетиленом

А.А. Манжуева, В.Б. Орел

E-mail: manana@cc.isu.ru

Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия

Взаимодействие циклогексанона с фенилацетиленом при 80°C в среде KOH/DMSO приводит, помимо ожидаемых по реакции C-винилирования α,β - и β,γ -ненасыщенных кетонов, к диспирокеталам, сборка которых инициируется реакцией этинилирования с образованием алкоголят-иона [1]. Для такой системы использование прецизионных подходов слишком ресурсоемко. Поэтому, целью данной работы являлось изучение применимости методов теории функционала плотности для реакции этинилирования. Выполненное исследование включает в себя расчеты геометрии, термодинамических свойств, активационных барьеров с использованием как теории функционала плотности в сочетании с различными базисными наборами, так и высокоточных методов (CBS-Q//B3 и G3). Энергия сольватации в ДМСО ($\epsilon = 46,8$) была дополнительно рассчитана с использованием модели IEFPCM. Все расчеты проводились с использованием пакетов программ GAUSSIAN.

Энергия активации реакции этинилирования, полученная с помощью CBS-Q//B3, равна $\Delta G^\ddagger = 10,8$ ккал/моль. Образование алкоголят-иона приводит к понижению энергии системы относительно исходных фенилэтинид-иона и циклогексанона на $\Delta G = -5,1$ ккал/моль. Оцененная энергия активации этой же стадии в методе G3 составляет $\Delta G^\ddagger = 11,3$ ккал/моль, а оценка термодинамических характеристик предсказывает понижение энергии на $\Delta G = -7,3$ ккал/моль. Результаты, полученные с использованием высокоточных методов, дают хорошее согласие друг с другом в активационных барьерах ($\Delta \Delta G^\ddagger = 0,5$ ккал/моль). При этом оба высокоточных подхода указывают на устойчивость алкоголят-иона.

Оценки изменений свободной энергии Гиббса в реакции этинилирования циклогексанона фенилэтинидом в рамках таких гибридных функционалов как B3LYP, BHandHLYP в базисе 6-31+G* предсказывают неустойчивость алкоголят-иона и не согласуются со значениями, предоставляемыми высокоточными методами. В то же время гибридный функционал PBE1PBE/6-31+G* дает сопоставимую оценку $\Delta G = -3,3$ ккал/моль. Учет дисперсионной поправки приводит к понижению энергии алкоголят-иона. В случае B3LYP(D3BJ) изменение свободной энергии переходит в отрицательную область $\Delta G = -1,3$ ккал/моль, а в случае PBE1PBE(D3BJ) понижение энергии составляет $\Delta G = -5,9$ ккал/моль, что еще лучше согласуется с данными CBS-Q//B3 и G3. По результатам, полученным в рамках дважды-гибридных методов (в которых также проводилась и оптимизация, и расчет энергии) B2PLYP и M062X образование алкоголят-иона оказывается термодинамически не выгодным процессом ($\Delta G = 6,5$ ккал/моль и $\Delta G = 4,5$ ккал/моль). Учет дисперсионной поправки на уровне B2PLYPD2 понижает энергию, но она по-прежнему остается в положительной области. При этом подход B2PLYP-D2/6-311+G**//B3LYP/6-31+G* дает сопоставимое с CBS-Q//B3 и G3 значение $\Delta G = -3,1$ ккал/моль [2].

Методы лучше всех предсказывающие значения ΔG (B2PLYP-D2//B3LYP и PBE1PBE) дают несколько завышенные активационные барьеры этинилирования ($\Delta G^\ddagger = 12,7$ ккал/моль и $\Delta G^\ddagger = 14,9$ ккал/моль). Таким образом, эти два метода могут быть использованы для моделирования реакции этинилирования циклоалифатических кетонов.

Работа выполнена по заданию Минобрнауки РФ FZZE-2020-0025

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

**g-фактор многозарядных ионов в основном и возбуждённых состояниях:
разложение по αZ для корреляционных поправок**

А.Д. Мошкин¹, А.В. Волотка², Д.А. Глазов², Д.В. Зиненко¹, А.В. Малышев¹

E-mail: st086491@student.spbu.ru

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

²Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Высокоточные измерения g-фактора многозарядных ионов обеспечили беспрецедентную проверку квантовой электродинамики в связанных состояниях [1-3]. На данный момент экспериментальная точность для водородо-, литие- и бороподобных ионов достигла значений порядка 10^{-9} — 10^{-11} [4-8]. В частности, на основе этих исследований было получено наиболее точное значение массы электрона [9,10]. Перспективы развития теории и экспериментов с g-фактором открывают перед нами возможность независимого определения параметров ядра, постоянной тонкой структуры и поиска новой физики [11-13]. При этом с повышением точности расчётов было установлено явное несоответствие между теоретическими и экспериментальными данными [14], что побуждает к дальнейшим исследованиям.

В данной работе исследуются корреляционные эффекты при малых значениях заряда ядра для кулоновского потенциала. Поправки на межэлектронное взаимодействие в приближении Брейта раскладываются по степеням параметра αZ для литиеподобных ионов в основном, а также возбуждённых $(1s)^2 2p_{1/2}$ и $(1s)^2 2p_{3/2}$ состояниях. В комбинации с высокоточными нерелятивистскими расчётами это позволит улучшить точность теоретических значений.

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

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

Р.А. Ниязов¹, Д.Н. Аристов^{1,2}, В.Ю. Качоровский²

E-mail: niyazov_ra@npri.nrcki.ru

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

²*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Дробовой шум обусловлен дискретностью зарядов и может быть определен как среднее значение квадрата отклонения тока от своего среднего значения. Он позволяет получить информацию, которую нельзя узнать только из измерений проводимости: заряд и статистика носителей тока, а также масштабы внутренней энергии системы [1]. Более удобным для анализа является фактор Фано, F , который представляет собой отношение дробового шума к шуму Шоттки. Для диффузионных проводников $F = 1/3$ – универсальное значение, которое не зависит от формы, длины или проводимости проводника.

В данной работе дробовой шум изучен в одномерных геликоидальных электронных состояниях. Такие состояния могут существовать на краю двумерных топологических изоляторов. В геликоидальных состояниях электроны с различными спинами распространяются в противоположные стороны. Был вычислен фактор Фано для геликоидальных состояний при наличии магнитных примесей. Показано, что при сильном туннелировании электронов в геликоидальные состояния магнитные примеси приводят к увеличению фактора Фано, при слабом – к уменьшению. Кроме того, в идеальном спиновом фильтре, который можно создать на основе геликоидальных состояний при наличии сильной магнитной примеси и прозрачных контактах [2], дробовой шум отсутствует.

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

1. Blanter Y., Büttiker M. // Physics Report. 2000. V. 336. P. 1-166.

2. Niyazov R.A., Aristov D.N., Kachorovskii V.Yu. // JETP Letters. 2021. V. 113. P. 689-700.

Исследования электронной структуры и свойств перовскитов методом «подстраиваемого-под-соединение» потенциала внедрения

***И.М. Одуд^{1,2}, Ю.В. Ломачук¹, Д.А. Мальцев¹, В.М. Шахова¹,
А.В. Олейниченко¹, Н.С. Мосягин¹, Л.В. Скрипников^{1,2}, А.В. Титов^{1,2}***

E-mail: odudilya@gmail.com

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия²ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», Санкт-Петербург, Россия

Последние десятилетия поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона осуществлялся экспериментаторами на двухатомных молекулах, однако подобные эксперименты не позволяют собрать достаточно большой статистики. В свою очередь, эксперименты по поиску ЭДМ электрона в материалах из-за большей плотности атомов по сравнению с молекулярными пучками и экспериментами в ловушках устраняют описанные недостатки. Другим перспективным направлением поиска Новой физики является поиск шиффовских моментов (ШМ) ядер, обусловленных T,P-нечётными взаимодействиями внутри ядер. ШМ ядра и ЭДМ электрона измеряются только в кристаллах с особыми свойствами. Одними из наиболее перспективных материалов являются перовскиты в сегнетоэлектрической фазе, такие как кристаллы BaTiO₃:Eu [1] (для ЭДМ электрона) или PbTiO₃ [2] (для ШМ ядра Pb). Для интерпретации результатов этих экспериментов в терминах фундаментальных характеристик Новой физики (ЭДМ электрона и ШМ ядра) необходимо использовать высокоточное моделирование исследуемых кристаллических систем в рамках релятивистского метода связанных кластеров.

В данной работе мы детально исследовали электронную структуру кристаллов BaTiO₃, PbTiO₃ и TiO₂ при помощи двухступенчатой схемы вычислений. Схема основана на методе «подстраиваемых-под-соединение» потенциалов внедрения (compound-tunable embedding potentials, СТЕР) [1-3], разработанных в нашей лаборатории (<http://qchem.pnpi.spb.ru>). Мы построили молекулярные кластеры TiO₆⁸⁻@СТЕР, BaO₁₂²²⁻@СТЕР и PbO₁₂²²⁻@СТЕР на основе кристаллических расчётов BaTiO₃, PbTiO₃ и TiO₂. Также нами были рассчитаны химические сдвиги K_α и K_β линий для атома Ba и K_α для атома Ti и проанализированы полученные результаты.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 20-13-00225-П)

1. Skripnikov L. V. et al. Enhancement of the electron electric dipole moment in Eu 2+ //Physical Review A. – 2011. – Т. 84. – №. 2. – С. 022505.
2. Skripnikov L. V., Titov A. V. LCAO-based theoretical study of PbTiO₃ crystal to search for parity and time reversal violating interaction in solids //The Journal of Chemical Physics. – 2016. – Т. 145. – №. 5.
3. V.M. Shakhova et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. 24, 32. 19333–19345
4. Y.V. Lomachuk et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. 22, 32. 17922–17931
5. N.S. Mosyagin et al. Int. J. Quant. Chem. 2019. 120, 2. e26076

Прямой расчёт переходных матричных элементов в релятивистской теории связанных кластеров

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

E-mail: oleynichenko_av@npri.nrcki.ru

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

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

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

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

⁵Тель-Авивский университет, Тель-Авив, Израиль

Одним из наиболее перспективных средств неэмпирического моделирования обширных классов низколежащих электронных состояний систем, включающих атомы нижней части периодической таблицы, является релятивистский метод связанных кластеров в формулировке для пространства Фока. Будучи высокоэффективным средством получения информации об энергетических характеристиках, этот метод в меньшей степени приспособлен для вычисления переходных значений свойств (недиагональных матричных элементов), в том числе дипольных моментов электронных переходов, определяющих вероятности большинства излучательных процессов в атомах и молекулах.

Предложена и реализована в виде компьютерной программы процедура расчета переходных матричных элементов операторов одночастичных свойств для многоэлектронных систем в рамках релятивистской теории связанных кластеров в пространстве Фока [1]. Процедура основана на приближении второго порядка по кластерным амплитудам для эффективного оператора свойства и обеспечивает связность его диаграммного представления и, таким образом, точную размерную согласованность. Схема также характеризуется высокой экономичностью и возможностью одновременного получения недиагональных матричных элементов для всех пар исследуемых состояний.

Разработанный метод был применён к описанию E1-переходов между низколежащими состояниями атомов стронция, радия, двухатомных молекул ThO [1] и AcF [2], а также примесных ионов Ce^{3+} и Th^{3+} в матрице ксенотима YPO_4 . Сравнение с доступными экспериментальными данными позволяет сделать вывод о высокой надежности предложенной схемы расчёта; для спин-разрешенных в атомах Sr и Ra переходов отклонение рассчитанных времен жизни возбужденных состояний от экспериментальных значений не превышает несколько процентов. Посредством расчёта дипольных моментов электронных переходов для молекулы AcF предсказаны наиболее интенсивные переходы из основного состояния; полученные данные позволили впервые в мире провести экспериментальное спектроскопическое исследование этой молекулы.

Разработка представленного варианта прямого метода расчета недиагональных матричных элементов свойств и моделирование переходов в атоме Ra выполнены А.В.О. и А.В.З. в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ гранта Российского научного фонда №20-13-00225-П, <https://www.rscf.ru/project/23-13-45028/>

1. Zaitsevskii A. et al. Theoretical molecular spectroscopy of actinide compounds: the ThO molecule. // Mol. Phys. P. E2236246.
2. Skripnikov L.V. et al. Ab initio study of electronic states and radiative properties of the AcF molecule. // J. Chem. Phys. 2023. V. 159. P. 124301.

Влияние учёта дисперсионной поправки на различных стадиях моделирования реакции [3+2]-циклоприсоединения *N*-бензилкетимина и фенилацетилена в суперосновной среде KOBu^t/DMCO

А.Г. Прадедова, В.Б. Кобычев

E-mail: pradedovaa@cc.isu.ru

Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия

В рамках комбинированного подхода B2PLYP/6-311+G**//B3LYP/6-31+G* с включением дисперсионных поправок и с учётом сольватационных эффектов с помощью модели поляризуемого континуума IEF PCM квантовохимически исследовано [3+2]-циклоприсоединение *N*-бензил-1-фенилэтан-1-имина к фенилацетилену с образованием 2,3,5-трифенил-1-пирролина в суперосновной среде KOBu^t/DMCO [1].

С включением дисперсионной поправки [2] только на этапе уточнения энергии методом B2PLYP/6-311+G** рассмотрены два возможных механизма реакции – согласованное и ступенчатое циклоприсоединение. В первом случае на начальной стадии реакции молекула *трет*-бутанола в переходном состоянии координируется по атому азота азааллильного аниона, что приводит к его винилированию с последующим замыканием в цикл. Активационный барьер такого присоединения оказывается лимитирующим и оценивается как $\Delta G^\ddagger=12,6$ ккал/моль. Образование цикла приводит к понижению энергии системы на $\Delta G=-18,5$ ккал/моль. Затем через ряд энергетически легко преодолимых прототропных перегруппировок образуется конечный 1-пирролин.

По ступенчатому же механизму *трет*-бутанол координируется уже со стороны фенилацетилена и система после первой стадии винилирования, проходя через меньшее число прототропных перегруппировок, также приводит к конечному продукту с лимитирующим барьером циклизации промежуточного аниона равным $\Delta G^\ddagger=15,7$ ккал/моль. Ввиду того, что разница в энергиях переходных состояний составляет всего $\Delta\Delta G=0,14$ ккал/моль, оба механизма оказываются равновероятными.

Учёт дисперсионной поправки [3] на стадии оптимизации геометрий несколько изменил геометрии стационарных точек за счёт некоторого сближения ароматических колец, однако результирующие энергетические характеристики реакции меняются в среднем не более чем на 1,5 ккал/моль. Таким образом, учёт дисперсионной поправки на стадии оптимизации геометрий стационарных точек не вносит существенного вклада в энергетические и структурные характеристики реакции и является в настоящее время общепринятой практикой.

В то же время включение дисперсионной поправки на этапе спуска по координате реакции из предполагаемого переходного состояния циклизации по согласованному механизму приводит к тому, что дисперсионное взаимодействие ароматических колец препятствует необходимой для замыкания цикла *цис*-деформации молекулы фенилацетилена, тем самым закрывая этот канал образования пирролинового кольца.

*Исследование проведено в рамках госзадания Минобрнауки РФ №FZZE-2020-0025 и при финансовой поддержке гранта Иркутского государственного университета для молодых учёных № 091-23-313 «Квантовохимическое моделирование реакции [3+2]-циклоприсоединения *N*-бензилкетимина и фенилацетилена в суперосновной среде KOBu^t/DMCO»*

1. Bidusenko I.A. et al. Base-Catalyzed [3 + 2] Cycloaddition of *N*-Benzyl Ketimines to Arylacetylenes Followed by Oxidation: A One-Pot Access to Polyarylated 2 *H*-Pyrroles via Intermediate Pyrrolines // Org. Lett. 2021. Vol. 23, № 11. P. 4121–4126.
2. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction // J. Comput. Chem. 2006. Vol. 27, № 15. P. 1787–1799.
3. Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory // J. Comput. Chem. 2011. Vol. 32, № 7. P. 1456–1465.

Алгоритм CROP для ускорения сходимости итерационной процедуры решения уравнений релятивистского метода связанных кластеров

А.С. Румянцев¹, А.В. Олейниченко¹, А.В. Зайцевский¹, А.В. Титов¹

E-mail: attoatom@gmail.com

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

Теоретический потенциал исследования материалов с лантаноидами и актиноидами, как правило, ограничивается теорией функционала плотности и нерелятивистскими подходами для описания периодических структур. Перечисленные методы в большинстве случаев не позволяют получать надежных результатов, так как волновые функции для соединений f-элементов часто имеют ярко выраженный многоконфигурационный характер, а для спектра состояний характерна высокая плотность низколежащих электронных состояний. Релятивистские методы связанных кластеров для многомерного модельного пространства (MR-CC) позволяют решить эту проблему.

Данная работа посвящена реализации вычислительных алгоритмов, позволяющих улучшить сходимость итерационных процедур решения амплитудных уравнений метода связанных кластеров.

На сегодняшний день для ускорения сходимости итерационной процедуры широко используется алгоритм DIIS. Однако при рассмотрении моделей с высокой вычислительной сложностью, в частности, явно учитывающих вклады трехкратных возбуждений, данный алгоритм требует большого объема оперативной памяти для хранения значений амплитуд на предыдущих итерациях. Для решения данной проблемы в работе [1] был предложен алгоритм CROP. В рамках этого подхода итеративное подпространство может быть сведено к трехмерному без потери скорости сходимости относительно DIIS. Метод CROP был реализован в пакете программ EXP-T [2]. Продемонстрировано, что метод CCSD с использованием DIIS и CROP обладает одинаковой скоростью сходимости, при этом для алгоритма CROP хранилось три значения амплитуд по сравнению с десятью для DIIS. Тесты проводились для воды и AsO^+ .

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 19-72-10019

1. Ettenhuber P., Jørgensen P. Discarding information from previous iterations in an optimal way to solve the coupled cluster amplitude equations // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. PP. 1518–1524.
2. Oleynichenko A. V., Zaitsevskii A. V., Eliav E. Towards High Performance Relativistic Electronic Structure Modelling: The EXP-T Program Package // Commun. Comput. Inf. Sci. 2020. V. 1331. PP. 375–386.

Поиск космологических решений теории вложения с использованием развёрнутых вложений

М.С. Сушков, С.А. Пастон

E-mail: matveysushkov34@gmail.com

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Теория вложения описывает гравитацию как динамику 4-мерной поверхности в N -мерном объемлющем пространстве. Эта поверхность описывается с помощью функций вложения, отображающих координаты 4-мерного пространства-времени в координаты N -мерного объемлющего пространства, и приводящих к индуцированной метрике, совпадающей с метрикой 4-мерного пространства-времени. Такой подход был предложен Т. Редже и К. Тейтельбоймом в 1975 году [1].

Если исходное 4-мерное пространство обладает некоей симметрией, то для её построения можно воспользоваться методом, предложенным в работе [2]. Этот метод заключается в следующем: есть некая группа симметрии 4-мерного пространства G , мы требуем, чтобы 4-мерная поверхность в объемлющем пространстве обладала этой симметрией. Это означает, что есть некоторая подгруппа группы преобразований объемлющего пространства, переводящая 4-мерную поверхность в себя и изоморфная группе симметрии G . Отображение группы G в группу преобразований объемлющего пространства есть гомоморфизм, то есть представление. Мы можем построить представление группы G как прямую сумму неприводимых представлений, после чего подействовать им на некоторый начальный вектор и получить заведомо симметричную поверхность.

Космологические модели вселенной обладают изотропией и однородностью по пространственным координатам. Это означает, что группа симметрии пространств таких моделей – полупрямое произведение $SO(3)$ на $T(3)$. Этой симметрией можно воспользоваться, чтобы построить вложения космологических моделей в 10-мерное плоское пространство. В качестве первого этапа этой работы было решено рассмотреть в качестве группы симметрии группу вращений $SO(3)$, а в качестве её представления – прямую сумму неприводимых представлений размерностей 1, 1, 3, 5. В качестве космологической модели вселенной была взята пространственно-плоская модель Фрийдмана. Полученные вложения были проверены на предмет развёрнутости [3], после чего они были использованы для решения уравнений Редже-Тейтельбойма.

1. Regge T., Teitelboim C. General relativity a la string: a progress report (Trieste, Italy, 1975) // Proceedings of the First Marcel Grossmann Meeting. 1977. Edited by Ruffini R. P. 77-88. arXiv:1612.05256.
2. Paston S.A., Sheykin A.A. Embeddings for Schwarzschild metric: classification and new results // Classical and Quantum Gravity. 2012. V. 29. N. 9. P. 095022. arXiv:1202.1204.
3. Paston S.A., Zaitseva T.I. Nontrivial isometric embeddings for flat spaces // Universe. 2021. V. 7 N 12. P. 477. arXiv:2111.04188.

Коэффициент усиления анапольного момента в катионе монооксида кремния***П.Д. Турченко^{1,2}, Л.В. Скрипников^{1,2}***

E-mail: p.d.turchenko@ya.ru

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

Анапольный момент — это один из электромагнитных моментов, появляющихся в мультипольном разложении векторного потенциала распределения тока конечной протяжённости [1], который локализован в ядрах с ненулевым спином. Из-за своего возникновения в результате взаимодействий, нарушающих пространственную чётность, исследование анапольного момента представляет интерес в рамках развития теории пространственно-нечётных взаимодействий в ядрах атомов.

К сегодняшнему моменту экспериментальное значение анапольного момента с высокой погрешностью было получено в атоме ^{133}Cs [2], в другом опыте установлено верхнее значение в ядре ^{19}F молекулы $^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}$ [3], готовится проведение ещё нескольких экспериментов [4,5]. Благодаря наличию близких по энергии вращательных уровней противоположной чётности в двухатомных молекулах, усиливающих эффекты нарушения чётности [6,7], поиск анапольного момента предлагается осуществлять именно в них, вследствие чего предметом исследования настоящей работы выступала молекула $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$.

В данной работе при помощи релятивистских подходов описания многоэлектронных систем было рассчитано значение коэффициента усиления анапольного момента в ядре ^{29}Si молекулы SiO^+ , который необходим для получения значения анапольного момента в этой молекуле.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ 19-72-10019-П

1. Ia. B. Zel'dovich, Electromagnetic Interaction with Parity Violation, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 33, 1531—1533 (1958).
2. C. S. Wood et al., Measurement of Parity Nonconservation and an Anapole Moment in Cesium, Science, 275, 1759—1763 (1977).
3. D. DeMille et al., Using Molecules to Measure Nuclear Spin-Dependent Parity Violation, Phys. Rev. Lett. 100, 023003 (2018).
4. S. Aubin et al., Atomic Parity Non-Conservation: the Francium Anapole Project of the FrPNC Collaboration at TRIUMF, Hyperfine Interactions 214, 163—171 (2013).
5. N. Leefler et al., Towards a New Measurement of Parity Violation in Dysprosium, arXiv:1412.1245v1 (2014).
6. O. P. Sushkov, V. V. Flambaum, Parity Breaking Effects in Diatomic Molecules, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 75, 1208—1213 (1978).
7. V. V. Flambaum, I. B. Khriplovich, On the Enhancement of Parity Nonconserving Effects in Diatomic Molecules, Phys. Lett. 110A, 121—125 (1985).

Релятивистское уравнение Фаддеева-Якубовского для ядра гелия-4***С.А. Юрьев¹, С.Г. Бондаренко¹***

E-mail: yu31415v926@yandex.ru

¹*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Прогресс в применении уравнения Бете-Солпитера для изучения релятивистских двухчастичных систем, в частности дейтрона при высоких энергиях [1], а также недавние успехи в применении формализма Бете-Солпитера-Фаддеева(БСФ) для изучения трехнуклонных ядер (гелион и тритон) (энергия связи, амплитуды состояний и электромагнитные формфакторы) [2,3] дают основание предполагать, что релятивистское обобщение уравнения Фаддеева-Якубовского(ФЯ) будет столь же успешным при описании релятивистских четырехнуклонных систем.

За основу в нашей работе взято нерелятивистское уравнение ФЯ [3] в интегральной форме для компонент полной четырехчастичной t -матрицы. Этот формализм имеет богатую историю и развит на достаточно хорошем уровне с теоретической точки зрения и успешно применён, в частности, к ядру гелия-4 [5].

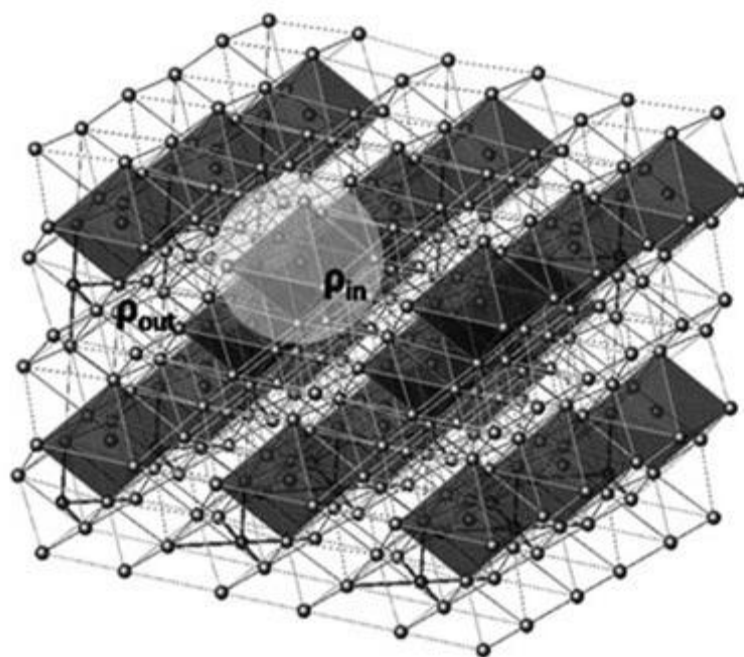
В нашей работе мы проводим обобщение нерелятивистского уравнения ФЯ на релятивистский случай методом, который был успешно применён для случая трёх частиц [6]. Далее мы решаем полученную систему интегральных уравнений методом итераций и тем самым находим энергию связи и амплитуды состояний ядра гелия-4. В качестве потенциала NN-взаимодействия мы используем одноранговый сепарабельный потенциал Ямагучи. Использование сепарабельного потенциала позволяет избавиться от одного интегрирования в интегральном уравнении, что существенно облегчает вычисления. В расчётах мы ограничиваемся рассмотрением только $3S_1$ парного состояния. В расчётах используется квадратурное разложение интегралов и проводится анализ сходимости результатов вычислений при росте числа точек квадратурного разложение. Для вычисления энергии связи с точностью до 1 МэВ оказывается достаточным сетки из 10 точек. Результат нашего расчёта даёт энергию связи ядра гелия-4 равной 56 МэВ. Аналогичный результат для нерелятивистского расчёта - 47 МэВ. Экспериментальное значение - 28,3 МэВ.

Исследования, проведённые в настоящей работе, показывают, что расчёты с использованием релятивистского обобщения уравнения ФЯ дают хоть и не совпадающие точно с экспериментальными данными, но все же реалистичные результаты. Это даёт основание полагать, что при замене простейших составляющих формализма на более совершенные будут получены результаты, превосходящие по точности нерелятивистские расчёты, как это имело место в случае исследования тритона и гелиона с использованием формализма БСФ. А именно, в первую очередь планируется добавить $1S_0$ состояние в расчёты, а также использовать более точные мультиранговые потенциалы NN-взаимодействия.

Помимо этого, с использованием полученных амплитуд состояния будут рассчитаны такие важные динамические характеристики как формфакторы гелия-4. Этот расчёт также будет сравнён с результатами нерелятивистских расчётов и с экспериментальными данными.

1. S. Bondarenko et al. // Prog. Part. Nucl. Phys. 2002. V.48. P. 449
2. S.G. Bondarenko, V.V. Burov, S.A. Yurev. // Nucl. Phys. A. 2020. V. 1004. P. 122065
3. S.G. Bondarenko, V.V. Burov, S.A. Yurev. // Nucl. Phys. A. 2021. V. 1014. P. 122251
4. O.A. Jacobovsky // Sov. J. Nucl. Phys. 1967. V. 5. P. 1312.
5. В.Ф. Харченко // ФЭЧАЯ. 1989. Том 10. № 4. С. 884
6. G. Rupp, J. A. Tjon // Phys. Rev. C. 1988. V. 37. P. 1729

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ



The Effects of Gamma Irradiation on TiN Nanocrystals

A.S. Abiyev^{1,2,3}, E.M. Huseynov^{1,3}

E-mail: afsunabiyev@gmail.com

¹*Institute of Radiation Problems, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Baku, AZ1143, Azerbaijan*

²*International Intergovernmental Organization Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

³*Innovation and Digital Development Agency, AZ1138 Baku, Azerbaijan*

The TiN nanopowder with a purity of sample 99.2 %, bulk density of 5.22 g/cm³, specific surface area 10-75 m²/g, and particle size to 20 nm (Sigma-Aldrich, Germany) was used as a sample. The sample was irradiated with ⁶⁰Co source with energy of 1.17 MeV at a K-25 radiation-chemical facility, (High Technologies Centres, Institute of Radiation Problems) by gamma rays at dose rate D = 0.27 Gy/s at different adsorbed doses.

TiN nanocrystals were irradiated with gamma rays at doses of 50 kGy for 9 hours, 200 kGy for 35 hours, 900 kGy for 6.5 days, and 3500 kGy for 35 days. Following irradiation, X-ray analysis was conducted for each dose. Changes in the spectra indicated a disruption in the long-range order of the crystal, which we identified as an increase in "half-width at half-maximum" and a complete degradation of small intensity peaks. The obtained results were refined using the Rietveld method in the FullProf program package [1]. In the table, changes induced in the crystal due to the impact of gamma rays have been demonstrated. As it appears, in crystals, as the dose increases, only a reduction in size has been observed

Space group	Dose of radiation	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>V</i> , Å ³
F m -3 m	Initial	4.24438(9)	4.24438(9)	4.24438(9)	76.461(9)
F m -3 m	9 hours 5 MRad	4.24225(7)	4.24225(7)	4.24225(7)	76.347(2)
F m -3 m	35 hours 20 MRad	4.23964(9)	4.23964(9)	4.23964(9)	76.206(3)
F m -3 m	6.5 days 90 MRad	4.23923(8)	4.23923(8)	4.23923(8)	76.183(3)
F m -3 m	35 days 350 MRad	4.23864(10)	4.23864(10)	4.23864(10)	76.152(3)

It has been determined that local amorphization occurs throughout the volume of the TiN crystal after irradiation with gamma rays. Experimental results show that the degree of amorphization in nano-sized TiN crystals increases by 2.5 % up to a radiation dose of 350 Mrad [2]. The findings suggest that TiN crystals are of practical importance as a radiation-resistant material.

1. Brager, A. (1939). An X-ray examination of titanium nitride. III Acta Physicochimica (USSR), 9, 617-632.
2. Amjad Khan, Arbab Mohammad Toufiq, Fawad Tariq, Yaqoob Khan, Rafaqat Hussain, Naureen Akhtar and Shams ur Rahman. (2019). Influence of Fe doping on the structural, optical and thermal properties of α -MnO₂ nanowires, Materials Research Express. volume 6. 065043. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab0aaf>.

Thermal oxidation resistance of carbon nitride coatings**K.M. Hasanov^{1,2}***E-mail: hasanovkanan11@gmail.com*¹*Institute of Radiation Problems, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Baku, AZ1143, Azerbaijan*²*International Intergovernmental Organization Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980, Russian*

In the last few years, ceramics gained more popularity in nuclear fusion applications due to their high insulation properties, heat, and radiation resistance when compared to other commonly used isolators [1-3]. Ceramic materials can be used for the elements of plasma facing (i.e., in diverters and as insulation coating of coils) or for the construction components of tokamaks [4]. In the first case, the materials are permanently exposed to different types of ionizing radiation generated inside the fusion chambers and they should possess certain properties; on the other hand, in the second case, the irradiation will be applied just in case of emergency and the properties should be different than those necessary for constant exposure [5].

The DSC measurements were carried out using the DSC3 STAR^e Systems manufactured by METTLER TOLEDO. The standard adiabatic calorimetry was performed in the temperature range of 300 K up to 1000 K at a heating rate of 5 K/min in an argon atmosphere at a flow rate (20 mL/min) and which is previously calibrated with indium. The cooling process was achieved with the help of the NITROGEN UN 1977 REFRIGERATED LIQUID analyzer cooling system and “digital temperature controller”. The error of weight determination did not exceed 1.02 % at 300 K and 1% at 1000 K [6]. It has been determined that during an isothermal process, the heat capacity of the TiNbCN coating remains constant in the temperature interval of 25°C to 600°C, with C/N ratio values of 0.6 and 1.6. In the TiNbCN(C/N=0.6) coating, the central peak at 590°C is observed in the heat capacity curve during both heating and cooling processes. Simultaneously, in the TiNbCN(C/N=1.6) coating, the central peak of the effect is characterized by broadening and deep endo- and exothermic effects. Furthermore, thermodynamic functions of the TiNbCN coating have been determined within the temperature range of 25°C to 600°C.

1. E. Demir, M.N. Mirzayev, A.B. Tuğrul, B.A. Abdurakhimov, S.I. Karaaslan, An experimental study on microstructure of tungsten alloys, *Surface Review and Letters*, 27 (07) (2020) p.1950169.
2. A. Vladescu, M.N. Mirzayev, A.S. Abiyev, A.G. Asadov, E. Demir, K.M. Hasanov, R.S. Isayev, A.S. Doroshkevich, S.H. Jabarov, Sv. Lyubchik, S. Lyubchik, E.P. Popov, Effect of Si and Nb additions on carbonitride coatings under proton irradiation: A comprehensive analysis of structural, mechanical, corrosion, and neutron activation properties, *Nuclear Materials and Energy*, 35 (2023) 101457.
3. M.N. Mirzayev, Oxidation kinetics of boron carbide ceramic under high gamma irradiation dose in the high temperature, *Ceramics International*, 46 (3), (2020) p.2816-2822.
4. M.N. Mirzayev, B.A. Abdurakhimov, E. Demir, A.A. Donkov, E. Popov, M.Yu. Tashmetov, I.G. Genov, T.T. Thabethe, K. Siemek, K. Krezhov, F. Mamedov, D.M. Mirzayeva, M.V. Bulavin, V.A. Turchenko, T.X. Thang, T.Z. Abdurakhmonov, P. Horodek, Investigation of the formation of defects under fast neutrons and gamma irradiation in 3C-SiC nano powder, *Physica B: Condensed Matter.*, 611 (2021) p. 412842.
5. M.N. Mirzayev, A.C. Parau, L. Slavov, M. Dinu, D. Neov, Z. Slavkova, E.P. Popov, M. Belova, K. Hasanov, F.A. Aliyev, A.Vladescu, TiSiCN as coatings resistant to corrosion and neutron activation, *Materials* 16 (2023) 1835.
6. M.N. Mirzayev, Heat transfer of hexagonal boron nitride (h-BN) compound up to 1 MeV neutron energy: Kinetics of the release of wigner energy, *Radiation Physics and Chemistry*, 180 (2021) p.109244.

Перпендикулярная магнитная анизотропия в тонких плёнках Fe/Gr/h-BN***Е.К. Михайленко^{1,2}, С.М. Дунаевский^{1,2}***

E-mail: mikhailenko_ek@npni.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия²Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова, Санкт-Петербург, Россия

Одним из активно развивающихся направлений в исследовании функциональных материалов является изучение ультратонких слоёв ферромагнетиков (Fe и Co), обладающих перпендикулярной магнитной анизотропией (“perpendicular magnetic anisotropy”, PMA) [1]. Подобного рода монослои синтезируют путем интеркаляции магнитных атомов (как правило кобальта или железа) под графен, выращенный на поверхности (111) гексагонального никеля [2], оксиде кремния SiO [3], иридии [4] и ряде других подложек.

В настоящей работе применением метода теории функционала плотности (DFT), реализованного в программном пакете Quantum Espresso, исследовалась магнитная анизотропия тонких плёнок Fe/Gr/h-BN с толщиной плёнки железа в N=1-2 монослоя. Так как поверхность железа (111), графен (Gr) и гексагональный нитрид бора (h-BN) формируют слои с близкими значениями межуатомного расстояния (~2.49 Å), то возможны несколько типов построения анализируемой структуры. В настоящей работе основное внимание уделялось трём типам соединения поверхностей железа с графеном, именуемым типами А, В и С.

Методика расчёта предполагала первоначальное вычисление значений магнитных моментов на всех атомах структуры, на этом этапе вычисления в релятивистских псевдопотенциалах проходили до достижения полной сходимости. На втором этапе происходили расчёты той же структуры с заранее заданными значениями значениями магнитного момента от угла $\theta = 0^\circ$ до $\theta = 90^\circ$ (угол между магнитным моментом и нормалью к слою).

Для выяснения характера анизотропии плёнки вычислена зонная энергия E^{band} , соответствующая различным углам ориентации магнитного момента. Анализ кривой зависимости этой энергии от угла θ позволяет оценить значения констант магнитной анизотропии K_1 и K_2 . Для выяснения равновесной магнитной конфигурации требуется учитывать кроме зонной ещё и энергию диполь-дипольного взаимодействия E^{md} , что было сделано отдельными от пакета Quantum Espresso вычислениями.

Данная работа является первым шагом на пути к исследованию магнитных и транспортных свойств наноструктур Fe/Gr/h-BN и nMBT(N)/h-BN, а также других гетероструктур на основе графена (Gr), нитрида бора BN, изоляторов Черна (CI) и топологических изоляторов (TI).

1. B. Dieny, M. Chshiev, Rev. Mod. Phys. 89, 025008, 2017.
2. G. Bertoni, L. Calmels, A. Altibelli, V. Serin, Phys. Rev. B 71, 075402, 2004.
3. C. Berger, Z. Song, et al., J. Phys. Chem. B 108, 19912, 2004.
4. N. Rougemaille, A.T. N'Diaye, et al., Appl. Phys. Lett. 101, 142403, 2012.

Исследование анизотропии критических токов ВТСП лент методом захвата магнитного потока в кольцах

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

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

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

Создание сверхпроводящих магнитных систем с использованием ВТСП лент второго поколения с высокими критическими параметрами требует учета зависимости критических токов лент (J_c) от величины и ориентации магнитного поля относительно плоскости лент. Большая величина отношения ширины ленты к ее толщине (более 1000) приводит к существенной анизотропии критических токов от ориентации магнитного поля. Высокие значения критических токов современных лент осложняют измерение токов такой величины традиционным резистивным методом. И производители лент, и исследователи широко используют бесконтактные методы определения критических токов, среди которых вычисление критических токов из гистерезисной зависимости намагниченности лент от магнитного поля [1], вычисление J_c из измеренного распределения поля тока над лентой датчиками магнитного поля [2], и вычисление J_c по захвату магнитного потока в кольце из ВТСП ленты [3]. Последний метод более предпочтителен, так как для определения критического тока в этом методе не требуется привлечения каких-либо моделей (например, модели критического состояния) или предположений о полевой зависимости критического тока. В этом методе в ВТСП кольцо вводится магнитный поток (внешним магнитом или введенным в полость кольца соленоидом), затем поле выключается и при помощи датчика Холла в центре кольца регистрируется поле токов, замороженных в кольце. В недавней работе [4] была предложена модификация этого метода, позволяющая измерять зависимость критического тока ленты от величины и ориентации локального магнитного поля.

С использованием модифицированного метода были проведены измерения захвата магнитного потока в кольце из ВТСП ленты фирмы СуперОкс (Москва) шириной 12 мм, критический ток которой при температуре жидкого азота достигает 500 А. Зависимость критического тока от величины локально приложенного магнитного поля величиной до 1.5 кЭ, созданного системой постоянных магнитов, показывает существенное уменьшение (на ~ 30 %) критического тока в этом интервале полей при $T=77$ К и нормальной ориентации магнитного поля. Зависимости критического тока от ориентации локального магнитного поля относительно плоскости ленты были получены для нескольких фиксированных ориентаций магнитного поля и показали немонотонную зависимость J_c от угла между направлением поля и плоскостью ленты. Существенной особенностью полученных ориентационных зависимостей критического тока является их заметная асимметрия относительно параллельной ориентации магнитного поля и плоскости ленты.

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

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

1. Sanchez A., Navau C. Critical-current density from magnetization loops of finite high-Tc superconductors // Superconductor Science and Technology. 2001,14 p.444.
2. Charles C., Paul N., George A., Jason D., Daniel J., Brian K. Investigation of the Relaxation of Persistent Current in Superconducting Closed Loops Made Out of YBCO Coated Conductors // IEEE Transactions on Applied Superconductivity (2015) 25 (3), 8200805.
3. Lee S., Kim W., Kim Y., Park S., Lee J., Hahn J., Hong G., Park I., Park C., Choi K. Characteristics of an HTS Pancake Coil in Persistent Current Mode Using Wind-and-Flip Winding Method // IEEE Transactions on applied superconductivity (2013) 23 (3) 4601305.
4. Chikurov D.S, Volkov M.P. Study of the anisotropy of critical currents in 2G-HTSC tapes by a non-contact method // St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1.1, p. 142-145.

Разработка бесконтактной магнитной муфты сверхпроводящего накопителя энергии

***И.В. Мартиросян, А.С. Стариковский, М.А. Осипов, В.В. Залеткина, Д.А. Александров,
С.В. Покровский³***

E-mail: mephizic@gmail.com

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

С момента открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах с критическими температурами T_c выше точки кипения жидкого азота (77 К) основные усилия направлены на реализацию энергоэффективных устройств на основе этих материалов. Отдельное внимание уделяется разработке высокоскоростных роторных систем, начиная от высокооборотных ВТСП подшипников, моторов и генераторов, и заканчивая насосами для перекачки криогенных жидкостей и сверхпроводящими накопителями энергии [1-3]. Одним из принципиально важных вопросов при разработке вращающихся ВТСП машин является вопрос реализации бесконтактной магнитной муфты. Магнитная муфта является одним из ключевых элементов конструкции кинетического ВТСП накопителя энергии и позволяет выполнять подвод и снятие энергии, накопленной маховиком. При этом от количества энергии, которую необходимо подвести или же снять зависит и требуемая скорость вращения устройства.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований и численного моделирования магнитосиловых и механических характеристик магнитной муфты для кинетического сверхпроводящего накопителя энергии. Рассмотрены магнитные приводы на основе постоянных магнитов (ПМ-муфты), а также сверхпроводящие магнитные приводы на основе композитных ВТСП лент (ВТСП-муфты) в радиальной и аксиальной геометриях. ПМ-муфты конструируются на основе кубических постоянных магнитов. ВТСП-муфты помимо постоянных магнитов включают ВТСП элементы – стопки ВТСП лент и обмотки. Численное моделирование выполнялось методом конечных элементов в среде инженерного моделирования Comsol Multiphysics с смешанной формулировкой, сочетающей формулировки в терминах магнитного векторного потенциала, магнитного скалярного потенциала, магнитного токового потенциала и компонент магнитного поля. Использование смешанной формулировки позволяет существенно сократить время вычислений, а также разрешает использование принципа движущейся сетки при моделировании вращающихся машин в трехмерной геометрии. Верификация численных моделей проводится путем сравнения результатов численного моделирования с экспериментальными данными по измерению магнитосилового взаимодействия между магнитными элементами конструкций.

Результаты исследований показывают, что ВТСП муфты обладают лучшими механическими характеристиками в сравнении с ПМ-муфтами. Исследования силы левитационного взаимодействия между ВТСП элементами и постоянными магнитами ВТСП приводов показали тенденцию насыщения зависимости силы левитации при увеличении размера ВТСП элементов. Это, в свою очередь, обозначает неэффективность наращивания объема ВТСП для достижения более высокой силы взаимодействия. На основе полученных результатов предложены эффективные методики увеличения силовых характеристик ВТСП-магнитных приводов.

Работа выполнена в рамках Госзадания (проект FSWU-2022-0013) при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ

1. E. Berrospe-Juarez, V. M. R. Zermeño, F. Trillaud, and F. Grilli. // Superconductor Science and Technology, 2019, vol. 32, no. 6, p. 065003
2. S. Zou, V. M. R. Zermeño, A. Baskys, A. Patel, F. Grilli, and B. A. Glowacki. // Superconductor Science and Technology, 2017, vol. 30, no. 1, p. 014010
3. T. Benkel // IEEE Transactions on Applied Superconductivity, 2020 vol. 30, no. 6, pp. 1-7.

Исследование частотных спектров $\varepsilon(\omega)$, $\sigma(\omega)$ системы наночастиц сегнетовой соли в матрице цеолита типа А**Т.Г. Матвеева¹**

E-mail: mtg88@yandex.ru

¹Филиал Псковского государственного университета в г. Великие Луки, Россия

Исследование сегнетоэлектрических материалов имеет как фундаментальное, связанное с решением общих вопросов физики твёрдого тела, так и прикладное значение, обусловленное перспективами использования новых материалов для создания современных функциональных устройств, которые широко применяются в промышленности. Наноконпозиты позволяют существенно изменять свойства материалов на основе использования размерных эффектов. Изменение этих свойств связано с изменением структуры сегнетоэлектрика в наноконпозитной матрице, а именно с изменением расстояния и симметрии расположения атомов в наночастицах. Кроме того, существенным вкладом также является взаимодействие включения с самой матрицей.

Диэлектрическая проницаемость и проводимость представляют собой макроскопические физические величины. Исследования их частотных спектров $\varepsilon(\omega)$, $\sigma(\omega)$ дают нам общее представление о макроскопических свойствах релаксационных процессов в гетерогенных материалах.

Цель работы: продолжение начатого нами в работах [1, 2] экспериментального определения характеристик фазового перехода в сегнетовой соли, диспергированной в матрице цеолита типа NaA, каркас которого содержит упорядоченную систему связанных друг с другом полостей с размерами ~ 1 нм [3].

Диэлектрическая проницаемость и проводимость исследовались при помощи высокоточного мостового измерителя – RLC-метра MS5308 на частотах 100 Гц, 120 Гц, 1 кГц, 10 кГц и 100 кГц методом двух параллельных проводников, представляющих собой проводящие пластины, между которыми помещался исследуемый диэлектрик. Температура измерялась на обкладке конденсатора с помощью двухканального термометра GM1312. Погрешность измерения диэлектрической проницаемости исследуемых образцов не превышала 5 %.

Получены температурные зависимости вещественной части диэлектрической проницаемости и проводимости на различных частотах для образца цеолита NaA, заполненного сегнетовой солью.

Из полученных результатов следует сильный рост проводимости наноконпозита с повышением температуры. Проводимость наноконпозита намного превышала проводимость объёмного твёрдого кристалла сегнетовой соли, что объясняется снижением энергии активации с уменьшением размеров частиц.

Значительная дисперсия диэлектрической проницаемости и характер проводимости в наноконпозите свидетельствуют о миграционной поляризации по механизму Максвелла-Вагнера.

1. Иванова М. С., Матвеева Т. Г. Соловьев В. Г. Размерная зависимость температуры фазового перехода в системах наночастиц сегнетоэлектриков, диспергированных в пористых матрицах // Актуальные проблемы физики твёрдого тела: [Электронный ресурс]: Сборник тезисов докладов X Международной научной конф., Минск, 22–26 мая 2023 / ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»; редколлегия: В. М. Федосюк (пред.) [и др.]. Мн.: А. Н. Вараксин, 2023. С. 328.
2. Матвеева Т. Г. Соловьев В. Г. Диэлектрические свойства наночастиц сегнетовой соли в матрице цеолита NaA // Техника радиосвязи. 2022. Вып. 4 (55). С. 118 – 124.
3. Брек Д. Цеолитовые молекулярные сита. М.: Мир, 1976. 781 с.

Критический ток слоистого высокотемпературного сверхпроводника с наклонными радиационными дефектами

А.Н. Мороз, А.Н. Максимова, В.А. Кашурников, И.А. Руднев, С.В. Покровский

E-mail: anmoroz@mephi.ru

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

Критический ток является важным параметром, характеризующим транспортные свойства высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП). Данная характеристика важна как для производства кабелей и лент (для обмоток ВТСП-магнитов), так и в левитационных системах. Как показывают исследования, критический ток в ВТСП определяется особенностями вихревой решетки и ее взаимодействием с центрами пиннинга. Особенно это актуально для левитационных систем [1,2], поскольку сила левитации может быть рассчитана исходя из распределения сверхпроводящих токов, которое определяется конфигурацией вихрей.

Распространенным методом создания центров пиннинга является облучение сверхпроводника ионами высокой энергии. При таком облучении появляются колончатые дефекты – треки, оставляемые заряженными частицами. Такой трек может пронизывать образец насквозь, радиус такого трека имеет порядок длины когерентности сверхпроводника. Влияние колончатых дефектов, наклонных по отношению к плоскости сверхпроводящих слоев, на вихревую систему ранее исследовалось экспериментально. Например, в работе [3] обнаружен эффект диода – зависимость величины критического тока от его направления. Однако экспериментальные исследования зачастую являются затратными, поэтому востребованными являются численные методы.

Целью нашей работы является численное исследование влияния наклонных дефектов на критический ток ВТСП в присутствии внешнего магнитного поля в общем случае произвольной ориентации.

Расчеты выполнены в рамках трехмерной модели слоистого ВТСП [4]. Вихревая нить рассматривается как стопка взаимодействующих слоевых вихрей, а энергия включает их взаимодействие друг с другом, с мейсснеровским и транспортным током, с плоской границей. В модель были введены наклонные колончатые и собственные центры пиннинга. Колончатые дефекты включали две подсистемы, имеющие разный наклон. Проанализирован случай наклона дефектов параллельно и перпендикулярно направлению тока.

Для наклонных дефектов показано наличие слабого максимума критического тока в полях порядка первого критического, не характерный для дефектов без наклона. Показано, что наклон дефектов снижает критический ток, менее выражено снижение для наклона параллельно направлению тока. Снижение критического тока больше в случае двух подсистем дефектов с разным наклоном. Повышение критического тока наклонными дефектами обеспечивается в наклонном поле. Также исследовано влияние наклона дефектов на кривизну вольт-амперной характеристики.

Работа выполнена в рамках Госзадания (проект FSWU-2022-0013) при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ

1. Aleksandrova I.V., Koresheva E.R., Koshelev E.L. A high-pinning-Type-II superconducting maglev for ICF target delivery: main principles, material options and demonstration models // High Power Laser Science and Engineering. 2022. V. 10. P. e11.
2. Huang H. et al. Numerical simulation and parameter identification of dynamic levitation force of HTS pinning Maglev for engineering application // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2021. V. 34. P. 2753–2760.
3. Matsui H. et al. Nonreciprocal critical current in an obliquely ion-irradiated YBa₂Cu₃O₇ film // Applied Physics Letters. 2023. V. 122. No. 17. P. 172601.
4. Lawrence W.E., Doniach S. Proceedings of the 12th International Conference on Low Temperature Physics. 1971. P. 361.

Композиционные материалы на основе термопластов, модифицированные малослойным графеном

Н.Д. Подложнюк¹, А.А. Возняковский¹, С.В. Кидалов¹, А.П. Возняковский²

E-mail: nikigod.1@gmail.com

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

²Научно-исследовательский институт синтетического каучука имени академика С. В. Лебедева, Санкт-Петербург, Россия

Графеновые материалы способны улучшать эксплуатационные свойства полимеров благодаря своим уникальным физическим характеристикам. Существует множество работ, в которых графеновые материалы применяются в качестве армирующих добавок для улучшения прочностных [1], теплофизических [2] и электрических свойств полимеров [3]. Однако, на сегодняшний день графеновые материалы не реализовали свой потенциал в промышленности в следствие недостатков существующих методик синтеза таких как низкая производительность, высокая дефектность конечного продукта и т.д. В нашем исследовании мы попытались решить данную проблему путем использования самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) для получения малослойного графена [4] и использовать его в качестве армирующей добавки к термопластам. Для изготовления образцов был использован метод FDM 3D-печати. К его достоинствам можно отнести простоту и скорость получения образцов, а также данный метод позволяет получать образцы полимерных композитов любой формы.

Целью данной работы является изучение свойств полимерных композитов модифицированных малослойным графеном.

В результате работы с помощью малослойного графена полученного методом СВС удалось увеличить прочность на изгиб на 17 % и теплопроводность на 40 % изделий на основе полилактида при концентрации добавки равной 0,5 масс.%. Также введение малослойного графена приводит к увеличению температуры размягчения полимера.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 20-53-04026 Бел_мол_a

1. Camargo J.C. et al. Mechanical properties of PLA-graphene filament for FDM 3D Printing // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2019. V. 103. 2423–2443
2. Jun J. et al. High thermal conductivity polylactic acid composite for 3D printing: Synergistic effect of graphene and alumina // Polymers for Advanced Technologies. 2019. V. 31. P. 1291–1299
3. Ivanov E. et al. PLA/Graphene/MWCNT Composites with Improved Electrical and Thermal Properties Suitable for FDM 3D Printing Applications // Appl. Sci. 2019. V. 9. P. 1209
4. Voznyakovskii A.A. et al. New Way of Synthesis of Few-Layer Graphene Nanosheets by the Self Propagating High-Temperature Synthesis Method from Biopolymers // Nanomaterials. 2022. V. 12. N. 4. P. 657.

Кристаллическая структура и магнетизм низкосимметричного $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ со смешанной валентностью марганца 2.5+*А.Е. Суслопарова, А.И. Курбаков*

E-mail: susloparovanna@mail.ru

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

Исследуемое в работе соединение $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ принадлежит к обширному классу сложных оксидов марганца $\text{LiMM}'\text{XO}_6$ ($\text{X} = \text{Sb}, \text{Te}$) в смешанно валентном состоянии с редкоземельными, щёлочноземельными элементами или щелочными металлами. Это слоистый теллурат с уникальной переменной валентностью марганца +2.5. При этом, более распространенными и изученными являются соединения с валентностью между 3+ и 4+. Такие оксиды марганца смешанной валентности обладают эффектом колоссального магнитосопротивления [1] и актуальны как перспективные материалы в энергетической промышленности, например, как катоды для литий-ионных аккумуляторов. Кроме того, установлено, что они способны к сильному поглощению света в диапазоне солнечного спектра и могут служить в качестве магнитных сенсоров, спинтронных и магнитокалорических устройств. С фундаментальной точки зрения, соединение $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ привлекательно для исследований благодаря наличию спиновых, зарядовых и орбитальных степеней свободы, часто неклассических и нетривиальных. Физика этих систем связана с переходом металл-диэлектрик, конкурирующими обменными взаимодействиями и их фрустрацией в магнитной подсистеме.

По данным рентгеновской дифракции $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ является соединением с совершенно новым структурным типом, принадлежит самой низкосимметричной пространственной группе $P1$, где каждый ион находится в своей общей позиции, а в кристаллической решетке можно обнаружить планарные, цепочечные и димерные мотивы, но при этом систему нельзя рассматривать как исключительно двумерную или одномерную.

Кристаллическая структура была определена на основе комплиментарного анализа нейтронных и синхротронных данных. $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ кристаллизуется в пространственную группу низшей сингонии $P1$, с параметрами элементарной ячейки $a = 5.0956(1)$, $b = 8.5566(2)$, $c = 5.0405(1)$, $\alpha = 92.651(2)$, $\beta = 92.145(2)$, $\gamma = 89.766(2)$. Триклинная кристаллическая структура $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ представляет собой сильно искаженный вариант орторомбической ($Pnn2$) структуры $\text{Li}_2\text{TiTeO}_6$ [2] с упорядочением Li/Mn на двух независимых позициях Li . При этом, сам $\text{Li}_2\text{TiTeO}_6$ является надстройкой, производной от LiSbO_3 . $\text{LiMn}_2\text{TeO}_6$ можно рассматривать как квазидвумерную или даже одномерную магнитную структуру, так как расстояния между тремя атомами $\text{Mn}-\text{Mn}-\text{Mn}$ (расстояния в зигзагообразных цепочках вдоль оси b , определенные из нейтронных измерений, короче, чем в двух других направлениях, а минимальные расстояния между слоями (только между двумя атомами) более 5 Å.

Проведены низкотемпературные измерения, на основе которых была предложена модель магнитной структуры. В магнитной подсистеме ниже температуры Нееля 20 К реализуется дальний антиферромагнитный порядок. Этим, ниже 13 К происходит резкое изменение магнитной части нейтронограмм, что связано с переходом магнитной структуры от несоизмеримой к соизмеримой. Установлен волновой вектор $\mathbf{k} = (0, 1/3, 1/2)$ при температуре 16 К. Магнитная структура при 2 К более сложная, представляет собой несоразмерную спираль с тремя компонентами.

1. Wagner P. et al. From colossal magnetoresistance to solar cells: An overview on 66 years of research into perovskites // *Physica status solidi (a)*. 2017. Т. 214. №. 9. С. 1770151.
2. J. Choisnet, et al., J. Ordering phenomena in the LiSbO_3 type structure: The new mixed tellurates $\text{Li}_2\text{TiTeO}_6$ and $\text{Li}_2\text{SnTeO}_6$ // *Journal of Solid State Chemistry*. 1989. Т. 82. №. 2. С. 272-278.

В.В. Залеткина¹, И.В. Мартиросян¹, С.В. Покровский¹, И.А. Руднев¹

¹E-mail: vivikills@list.ru

¹Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва, Россия

Генераторы и вращающиеся машины на основе ВТСП-элементов на сегодняшний день являются актуальным предметом исследований в технической сфере. Одно из самых распространенных и многообещающих применений сверхпроводников (СП) в генераторах – магниты захваченного потока (МЗП) [1]. Величина захваченного магнитного потока в сверхпроводниках может достигать гораздо больших величин по сравнению с величинами магнитного поля редкоземельных магнитов. Их внедрение в конструкцию вращающейся машины приводит к улучшению отношения мощности к крутящему моменту и, следовательно, к повышению эффективности работы устройства. В настоящее время в моделях сверхпроводниковых генераторов в качестве МЗП выступают объемные керамические образцы и стопки из ВТСП-композитов II поколения. Однако МЗП, выполненные из кольцевых элементов на основе ВТСП-лент (ring-shape tape), могут дать лучшие результаты по причине простоты их масштабирования [2]. Помимо этого, такие элементы лишены несверхпроводящих соединений, являющихся источниками тепловых резистивных потерь.

В данной работе представлены результаты расчетов численной модели процесса намагничивания кольцевых ВТСП-лент в терминах напряженности магнитного поля (Н-формализм) и магнитного векторного потенциала (А-формализм). В моделях реализовано два метода намагничивания: приложение однородного магнитного поля и использование постоянного магнита в качестве локального источника магнитного поля. Проведена экспериментальная верификация результатов расчетов. Она показала качественное совпадение форм экспериментального и расчетного распределений захваченного магнитного потока. Достигнуто снижение времени расчета благодаря использованию А-формализма.

Работа выполнена в рамках Госзадания (проект FSWU-2022-0013) при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ

1. Patel A. et al. A trapped field of 17.7 T in a stack of high temperature superconducting tape // Supercond. Sci. Technol. IOP Publishing, 2018. Vol. 31, № 9. P. 09LT01.
2. M. Zulfiqar Ali, J. Zheng, F. Huber 4.6 T generated by a high-temperature superconducting ring magnet // Supercond. Sci. Technol., Vol. 33, 2020.

Исследование особенностей магнитного упорядочения квазидвумерного теллулата $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$

Н.С. Фокин, А.Е. Суслонарова, А.И. Курбаков

E-mail: fokin_ns@npri.nrcki.ru

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

Соединения с составом $\text{A}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ (где А- ион одновалентного металла, в данном случае Li) относятся к классу квазидвумерных оксидов и благодаря ряду уникальных кристаллических и магнитных свойств имеют перспективы в применении в области электрохимии [1], аккумуляторных материалов [2], катализа [3] и многих других.

В настоящей работе, методом нейтронной дифракции изучены кристаллическая структура и особенности магнитного упорядочения в двух квазидвумерных оксидах стехиометрического состава $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, полученных путём ионообменного синтеза из разных прекурсоров: $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ и $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$.

Серия экспериментов проводилась на нейтронном порошковом дифрактометре G4.1 (LLB, Сакле, Франция) в диапазоне температур 1.5-35К с шагом 5К. Длина волны монокроматического излучения составила 2.4283Å. Эксперимент выполнялся с использованием фокусирующего монохроматора на основе пирографита ($hkl = 002$).

Обработка полученных экспериментальных данных осуществлялась с применением полнопрофильного анализа методом Ритвельда в программном пакете FullProf.

Оба образца, вне зависимости от используемого прекурсора кристаллизуются в ромбическую пространственную группу *Smca*, которая относится к типу T2 (где Т-тетраэдрическая координация щелочного иона, 2 - период повторяемости слоев при данной упаковке). В направлении оси *c* происходит чередование немагнитных слоев, содержащих ионы Li^+ с магнитными, которые состоят из ионов Ni^{2+} и Te^{6+} , находящихся в октаэдрической координации с ионами кислорода. Особенностью магнитных слоев является сотообразное расположение ионов никеля, окруженных шестью ионами теллура. У образца, полученного из $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ была обнаружена примесная фаза (16 вес. %) того же стехиометрического состава, имеющая моноклинные искажения и кристаллизующаяся в пространственную группу *C2/m*.

Для уточнения магнитной структуры был использован подход магнитных Шубниковских групп, проведенный с использованием сервиса MaxMagn на сайте Bilbao Crystallographic Server [4]. В данном подходе используется информация о кристаллической структуре (пространственная группа, параметры ячейки и координаты магнитного атома), а также волновой магнитный вектор *k*. В нашем случае положение магнитных рефлексов описывает $k = (0.5\ 0\ 0)$.

Упорядоченная спиновая конфигурация образца $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, полученного из $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ была предложена на основе обработки данных нейтронной дифракции, полученных при $T = 1.5$ К. Спиновая структура соответствует магнитной группе *P_{ab}cn* и представляет собой соизмеримую структуру типа “пчелиные соты” с двумя магнитными подрешетками, одна из которых характеризуется ферромагнитным характером упорядочения спинов, а вторая антиферромагнитным. Суммарный магнитный момент составил: 2.54(4) μ_B/Ni .

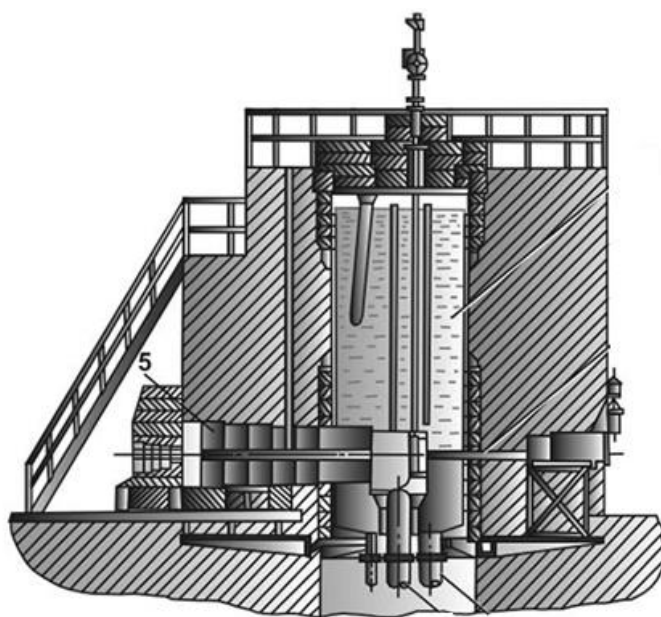
1. Evstigneeva M.A., Nalbandyan V.B., Petrenko A.A. et al. // Chem. Mater. 2011. V. 23. P. 1174.

2. Pu Y., Liu Y., Liu D. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2018. V. 43, P. 17271.

3. Kadari R., Velchuri R., Sreenu K et al. // Mater. Res. Express. 2016. V. 3. P. 115902.

4. Шубников А. В. Симметрия и антисимметрия конечных фигур. – Изд-во Академии наук СССР, 1951

ФИЗИКА И ТЕХНИКА РЕАКТОРОВ И УСКОРИТЕЛЕЙ



Исследование нейтронно-физических характеристик реактора типа ВВЭР-СКД с МОХ-топливом

А.В. Григорьева¹

E-mail: avg86@tpu.ru

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Реакторы четвертого поколения представляют собой новое поколение ядерных реакторов, которые отличаются от предыдущих поколений более безопасной, экономически эффективной и устойчивой конструкцией, а также предлагают новые возможности для использования ядерной энергии [1].

В контексте развития ядерной энергетики, реакторы ВВЭР-СКД (сверхкритического давления) представляют собой новое поколение реакторов с улучшенными техническими и эксплуатационными характеристиками. Однако, исследования и расчеты нейтронно-физических параметров таких реакторов с применением МОХ-топлива находятся только в начальной стадии разработки.

В данной работе была проведена оценка влияния различных топливных композиций с содержанием урана, плутония и тория на нейтронно-физические характеристики, такие как запас реактивности, длительность кампании топлива и глубина выгорания с различным содержанием делящегося материала (1%, 5%, 10%, 15%, 19,9%) [2].

В ходе исследования было обнаружено, что смешанное уран-плутониевое топливо с низким обогащением (PuO_2+UO_2) может быть пригодным для реактора ВВЭР-СКД. При содержании делящегося материала 1% и 5% данная топливная композиция обеспечивает высокую глубину выгорания и длительность кампании в 10000 суток. Однако, для использования других топливных композиций, таких как диоксид урана (UO_2) и смешанное топливо на основе тория (ThO_2+UO_2), требуется более высокое содержание делящегося материала.

В ходе исследования влияния содержания плутония в МОХ-топливе было выявлено, что топливная композиция с 5% содержанием плутония имеет достаточно низкое значение запаса реактивности 0,52%, что соответствует безопасности реакторной установки и устойчивой работе в процессе эксплуатации. Также для данной композиции характерно достаточно высокое значение глубины выгорания и сверхдлинная кампания ядерного топлива, которая составляет величину порядка 5000 суток.

1. Глебов А.П. Реакторы SCWR для будущей атомной энергетики в России и мире. // Сборник трудов 11-й международной научно-технической конференции «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР», 21-24 мая 2019. Подольск, Россия, ОКБ «ГИДРОПРЕСС». – ГНЦ РФ-ФЭИ, Обнинск. – 18 с.
2. Глебов А.П., Клушин А.В. Предварительные нейтронно-физические расчеты экспериментального реактора ВВЭР-СКД-30 //Работа проводилась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, государственный контракт № 14.512. 11.0107. – 2013. – С. 118.

Влияние условий эксплуатации реактора на характер радионуклидного загрязнения реакторного графита

Н.Н. Громов, К.Ю. Козаков, А.В. Степанов, Ю.Н. Смирский, А.Г. Волкович

E-mail: strizh31@yandex.ru

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Графит – один из важнейших реакторных материалов. Его используют в качестве замедлителя и отражателя нейтронов, вводят в состав топливных элементов. Облученный графит составляет значительную часть твердых радиоактивных отходов атомной промышленности. Проблема утилизации облученного графита имеет международный характер, т.к. во всем мире накоплено около двухсот тысяч тонн облученного в реакторах графита. В России работают 11 блоков АЭС с РБМК (4 блока на Ленинградской АЭС) и на момент окончания их эксплуатации масса облученного графита достигнет 60 тыс. тонн. Таким образом, при выводе из эксплуатации уран-графитовых реакторов возникает особая проблема: необходимость оперировать огромными количествами радиоактивных графитовых изделий.

В результате длительного облучения нейтронами, в реакторном графите, происходит активация примесей и образуются радионуклиды с разным периодом полураспада. Особого внимания заслуживают долгоживущий β -излучающий нуклид ^{14}C и биологически активный β -излучающий радионуклид – тритий. В случае возникновения аварийных ситуаций в процессе эксплуатации реактора значительный вклад в радионуклидное загрязнение реакторного графита вносят продукты деления ядерного топлива. Поэтому наряду с определением концентраций ^{14}C и ^3H в реакторном графите необходимо контролировать его загрязнение ^{137}Cs и ^{90}Sr .

В работе исследовано загрязнение графитовой кладки исследовательского водоохлаждаемого уран-графитового реактора (РФТ) НИЦ «Курчатовский институт». В настоящее время реактор демонтирован [1,2]. Так же были исследованы образцы графита из реактора ЛАЭС. Установлено, что в образцах облученного графита РБМК ЛАЭС основными загрязняющими радионуклидами являются ^{14}C и ^3H . В то же время значительный вклад в загрязнение вносят продукты деления: ^{137}Cs и ^{90}Sr . Показано, что в образцах облученного графита исследовательского реактора РФТ, за исключением активной зоны реактора, концентрации ^{14}C и ^3H незначительны. В активной зоне они увеличиваются более чем на 2 порядка, достигая значений 10^4 Бк/г, что согласуется с их активационной природой. Таким образом, очевидно, что основными радионуклидами, загрязняющими облученный графит реактора РФТ, являются продукты деления ядерного топлива ^{137}Cs и ^{90}Sr , что позволяет предположить аварийный характер загрязнения. Концентрации компонентов продуктов деления в графитовой кладке реактора РФТ практически не изменяются по глубине, что подтверждает аварийную природу загрязнения.

Очевидно, что характер эксплуатации промышленных и исследовательских реакторов различны, что обуславливает различный характер загрязнения облученного реакторного графита.

- 1 Н.Н. Громов, А.В. Степанов, В.В. Лукьянов, Ю.Н. Смирский, «Исследование радионуклидного загрязнения производственных помещений исследовательского реактора в процессе его демонтажа», Международная научно-практическая конференция «Экологическая, промышленная и энергетическая безопасность-2019», Сборник статей, с.471-475, г. Севастополь, 23-26 сентября 2019 г.
- 2 А.Г.Волкович, И.А. Сёмин, Ю.Н. Смирский, А.В. Степанов. «Об исследовании радионуклидного загрязнения облученного реакторного графита». – Сборник тезисов X Российской конференции с международным участием «Радиохимия-2022», с.450, г. Санкт-Петербург, 26-30 сентября 2022 г.

Радиационное обследование оборудования системы удаления жидких отходов исследовательских реакторов МР и РФТ

К.Ю. Козаков¹, Е.А. Степанов¹, А.В. Чесноков¹, Н.Н. Громов¹, А.В. Степанов¹

E-mail: constantine-kozakov@yandex.ru

¹НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Система удаления жидких отходов (СУЖО) реакторов МР и РФТ, предназначалась для предварительной очистки от радионуклидов, сбора и временного хранения загрязнённых радиоактивными веществами сбросных вод, поступающих из технологических помещений реакторов МР и РФТ перед сбросом их на станцию перекачки. Ликвидация этой системы не входила в проект вывода из эксплуатации реакторов в виду отсутствия оценки состояния радиационной обстановки в этой части объекта.

Для завершения проекта вывода из эксплуатации данных реакторов должен быть проведен демонтаж этой системы с последующей реабилитацией площадки расположения зданий реакторов и их вспомогательных систем, в которые и включена система СУЖО.

С целью реализации вышеперечисленных работ по проекту вывода из эксплуатации реакторов было проведено радиационное обследование ее оборудования и помещений ее размещения.

В результате обследования оборудования СУЖО и помещений были получены следующие результаты: МАЭД γ -излучения в каньонах фильтр-колонн до 30 мЗв/ч, плотности потока частиц с поверхностей с α - и β - излучающими радионуклидами в подвальных помещениях достигают 6000 част./см²*мин (по β), объемная активность радиоактивных аэрозолей в воздухе помещений периодического пребывания персонала не превысил 0,19 Бк/м³, удельная активность радионуклидов в пробах жидкостей составила 3×10^6 Бк/л по ¹³⁷Cs.

Данные обследования дали подробные данные по радиоактивному загрязнению оборудования системы и помещений её размещения. Они позволят приступить к подготовке ликвидации СУЖО и дезактивации помещений, помогли дать оценку потенциальной радиационной опасности для персонала НИИ «Курчатовский институт» непосредственно осуществляющего демонтажные и дезактивационные работы, что будет являться завершающей стадией проекта по выводу из эксплуатации реакторов МР и РФТ с последующей реабилитацией территории площадки.

1. Иванов О.П., Семенов С.Г., Лемус А.В., и др., «Демонтаж оборудования реактора МР», –Атомная энергия, т. 119, вып.1, 2015, стр. 50-55.
2. Коробов В.Ю., Кузнецова Т.И., Курский А.С., и др., «Разработка критериев для определения соответствия радиационных параметров выведенного из эксплуатации реактора МР заданному конечному состоянию», АНРИ, №4(99), 2019. стр.27-33.

Станция для томографических и радиографических исследований NT1

А.А. Павельева, Е.В. Алтынбаев, Д.Н. Трунов

E-mail: paveleva_aa@npri.ru

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

Методы визуализации, основанные на применении нейтронов, имеют высокую скорость развития и стали универсальными инструментами неразрушающего анализа во многих областях исследований.

Стоит отметить, что особый тип взаимодействия нейтронов с веществом, в сравнении с электронами, протонами и рентгеновским излучением, делает методы нейтронную радиографию и томографию не только уникальными, но и прекрасно дополняющими основанные на других типах излучения методы исследования [1]. Что обеспечивается способностью нейтронов проникать сквозь слои металлов, керамики и органических материалов, сохраняя при этом высокую чувствительность к легким элементам и способность к различию изотопов.

Диапазон текущих и потенциальных приложений данных методов достаточно широк, включая общие исследования материалов и систем, связанных с производством и использованием возобновляемых источников энергии [2], а также примеры из биологии [3], палеонтология [4], культурное наследие [5] и специальные инженерные материалы. В данной работе собраны применения методов нейтронной визуализации, проиллюстрированные примерами, выбранными из области материаловедения.

Нейтронная радиография на непрерывных источниках нейтронов основана на пропускании коллимированного пучка тепловых или холодных нейтронов через образец и регистрации ослабленного пучка позиционно-чувствительным детектором. Ступенчатое вращение образца в пучке позволяет получить набор угловых проекций, которые необходимо использовать на следующем этапе для томографической реконструкции. Таким образом, весь объем может быть представлен в 3D - виде путем восстановления свойства затухания для каждой точки выборки из собранных проекций с применением математических алгоритмов [2].

Реактор ПИК — один из самых мощных в мире (100 МВт) высокопоточных источников нейтронов. Предназначен для исследований в области фундаментальной физики, ядерной физики, физики конденсированного состояния, материаловедения, молекулярной биофизики и производства изотопов. На базе реакторного комплекса ПИК ведутся работы по реализации станции томографических и радиографических исследований NT1. Ввод в эксплуатацию намечен на 2026 год. Предлагаемая структура станции NT1 представлена на рисунке 3.

Таким образом, можно сделать вывод, что методы нейтронной визуализации не имеют аналогов и становятся прекрасными в отрасли неразрушающих исследований в широких областях применения. Спектр приложений включает в себя самые широкие области исследований.

1. Kardjilov N. et al., Advances in neutron imaging // Materials Today. 2018.
2. R. Woracek et al., Nuclear Instruments // Methods Phys. Res., Sect. A 878. 2018.
3. S. Le Cann et al., J. Mech. Behav, Biomedical // Materials. 2017.
4. C. Zanolli et al., Physics Procedia. 2017.
5. M. Laaß, B. Schillinger, Physics Procedia. 2015.

Межконтурная миграция трития на АЭС

О.Ю. Стегачева, М.В. Васильева, В.В. Ирошников

E-mail: olgast-03@yandex.com

Проектно-изыскательский центр г. Санкт-Петербург АО КИС «ИСТОК», Санкт-Петербург, Россия

Одной из проблем на атомной энерготехнологической станции с высокотемпературным газоохлаждаемым реактором (АЭС с ВТГР) является повышенная миграция трития через физические барьеры при высоких температурах. Образованный тритий может распространиться по 1 и 2 контурам, и попадать в конечный продукт.

Являясь радиоактивным изотопом водорода, тритий в составе практически любых водородосодержащих веществ может поступать в окружающую среду и организм человека. Вследствие своей генетической значимости, тритий отнесен к основным дозообразующим радионуклидам, его вклад в суммарную эффективную дозу облучения населения оценивается на уровне нескольких процентов [1]. Воздействие трития должно тщательно контролироваться и ограничиваться.

В настоящей работе оценена возможность выхода трития в окружающую среду на перспективной АЭС с ВТГР. Проведенный анализ подтверждает безопасность проектируемой атомной станции и позволяет минимизировать расходы на системы очистки.

На АЭС с ВТГР в активной зоне за счет облучения нейтронным потоком, тритий может образовываться за счет следующих процессов:

- активации He^3 , содержащегося в гелии первого контура;
- активации нейтронами примесей лития в графите;
- нейтронного захвата на боре, содержащемся в СУЗах;
- тройного деления [2,3].

Одновременно с образованием трития происходит процесс его удаления за счет следующих составляющих:

- утечки трития из первого контура вместе с гелием (вследствие негерметичности I контура);
- очистки трития системой очистки;
- диффузии через поверхность теплообменника в теплоноситель второго контура;
- радиоактивного распада.

Во втором контуре происходят аналогичные процессы удаления трития, с диффузией его в третий контур (окружающую среду).

Проведенный анализ при помощи математического моделирования показал, что при условии наличия водорода в третьем контуре АЭС с ВТГР, выход трития в третий контур может быть практически исключен, что позволяет сделать вывод о безопасности использования АЭС с ВТГР. Стоит отметить, для более детального определения межконтурной миграции трития необходимо уточнение оценок коэффициента диффузии трития, подкрепленное большим количеством экспериментальных данных для анализа констант проникновения трития из контуров.

1. Магомедбеков Э.П., Растунова И.Л. Тритиевые проблемы при эксплуатации ядерных энергетических установок // Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами: сборник докладов Тринадцатой Международной школы молодых ученых и специалистов им. А.А. Курдюмова / Под ред. д-ра техн.наук А.А. Юхимчука. Саров. 2020. С. 224-249.
2. Alexandre Jousse. Tritium transport in very high temperature reactors for hydrogen production // Report UCВТН07-005. 2007. University of California at Berkeley Department of Nuclear Engineering.
3. Daesik Yook, Kun Jai Lee, Youngwoo Lee and Daeseok Hong. Estimation of the Tritium Behavior in the Pebble Type Gas Cooled Reactor for Hydrogen Production // Journal of nuclear science and technology. 2006. V. 43, N. 12, P. 1522–1529.

М.С. Анисимов¹, В.В. Горев^{1,2}

E-mail: efruit.has21@gmail.com

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

²Национальный исследовательский центр Курчатовский институт, Москва, Россия

Активное развитие ускорителей, используемых в науке, в частности таких проектов как БАК (Большой Адронный Коллайдер) привело к возникновению следующего общественного мнения: «Ускорители элементарных частиц – исключительно научный инструмент». К сожалению, такое мнение распространено и среди учёных физиков, работающих в иных областях не связанных с изучением частиц. В связи с вышеизложенным является актуальным анализ современного состояния ускорительной техники, используемой в промышленности, медицине и пр. Также актуальность обеспечивается тем, что, чётко сформированная политика развития ускорителей на базе анализа современного состояния ускорительной техники в той или иной отрасли народного хозяйства позволит эффективней распределять ресурсы для развития техники и экономики в России.

Целью данной работы является анализ современного состояния ускорительной техники, используемой в промышленности, медицине и защите государства.

Для решения данной задачи была собрана статистика задействованных в России и в мире ускорителей для нужд народного хозяйства. И как показывает статистика всего в мире около 30 000 ускорителей, задействованных в народном хозяйстве и только 1% от этого количества расположены в России [3,4]. Ещё более интересным фактом оказалось сравнение мирового использования ускорителей по отраслям и в России. Так в мире наблюдается следующее распределение: медицина - 33%, наука - 3%, промышленность – 64%. В свою очередь в России иное распределение: медицина - 37%, наука - 20%, промышленность – 43% [1,3].

Для определения наиболее перспективных направлений развития ускорительной техники был проведён анализ современных и перспективных технических решений по применению ускорителей в народном хозяйстве. Что позволило выделить следующие актуальные области: трансмутация ядерных отходов, подкритические реакторы, управляемые протонным ускорителем, термоядерный синтез, создание новых материалов, очистка дымовых газов, сточных вод, воздуха, электронная, рентген, протонная и ионная терапия, получение радиоизотопов, радиационные методы обработки материалов, ионная имплантация, электронная сварка, радиационная интроскопия, высокоэнергетическая радиография и пр. [1,2]. В частности, стоит отметить применение ускорителей в медицине, а именно протонную и ионную терапию. Данные типы терапии позволяют достаточно точно и глубоко поражать раковые опухоли разрушая их ДНК. При это минимизируя повреждения здоровых клеток. В РФ на данный момент действует 90 центров протонной и ионной терапии.

Как показала мировая практика внедрение ускорителей в данные области благоприятно влияет на техническое и экономическое развитие государства, а также создаёт лучшие условия для дальнейшего развития ускорительной техники.

1. Забаев В.Н. Применение ускорителей в науке и промышленности: учебное пособие. // В.Н. Забаев. – Томск: Изд. ТПУ, 2008. – 195 с.
2. Пономарев А. В. Трансмутация радиоактивных отходов в ускорителях заряженных частиц / А. В. Пономарев // Двадцать шестая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных: материалы конференции. Информационный бюллетень (Уфа, 27 марта - 03 апреля 2020 г.). — Екатеринбург – Ростов-на-Дону – Уфа: ООО "Альтаир", 2020. — С. 142.
3. Черняев А.П., Варзарь С.М., Борщеговская П.Ю., Белоусов А.В., Близнюк У.А. Ускорители в мировом хозяйстве. // Письма в ЭЧАЯ. 2016. Том 13, №7(205), 1541 – 1545 с.
4. Henning W., Shank C. Accelerators for American. // Symposium and Workshop Chairs, Sandbox Studio, Chicago, Illinois, June 2010.

Создание модельного соленоида импульсного сильноточного ВТСП индуктивного накопителя энергии в системе питания сверхпроводящих магнитов Бустера и Нуклотрона NICA

И.И. Донгузов¹, Д.Н. Никифоров¹, М.С. Новиков¹, А.А. Котова¹, М.В. Петров¹, Г.Г. Ходжибагян¹, А.В. Шемчук¹

E-mail: donguzov@jinr.ru

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

SMES (Superconducting Magnetic Energy Storage) [1] – индуктивный накопитель энергии, изготавливаемый для уменьшения пульсаций в рабочем токе сверхпроводящих магнитов Бустера и Нуклотрона NICA, влияния индуктивной нагрузки на электрическую сеть, и снижения расхода электроэнергии. Основным элементом SMES является соленоид из высокотемпературного сверхпроводящего (ВТСП) кабеля [2]. Для обеспечения стабильной и долговременной работы SMES ведётся создание модельного соленоида меньшего масштаба, той же конструкции каркаса, кабеля, спаев, из тех же материалов и на том же оборудовании, что и полномасштабный SMES. При этом у модельного соленоида должны достигаться те же механические напряжения, величина рабочего тока относительно поля, изгибы кабеля.

Разработана конструкция модельного соленоида, подготовлена конструкторская документация, ведётся изготовление деталей. Внутренний диаметр соленоида 298.7 мм, внешний – 458.7 мм, высота обмотки 520 мм. Энергия соленоида при токе 15 кА составляет 200 кДж. ВТСП кабель для модельного SMES состоит из мельхиоровой трубки диаметром 8 мм, на которую наматывается 8 слоёв ВТСП лент, в каждом слое до 5 лент шириной 4 мм. Изоляция кабеля состоит из каптона и препрега. Соленоид состоит из 4 коаксиальных секций в один слой намотки кабеля каждая. На стеклотекстолитовые трубы наматываются изолированные латунные профили, в них вматывается ВТСП кабель, далее – верхние профили секции. Затем наматывается бандаж из нержавеющей ленты и препрега.

Защита от повреждения ВТСП при потере сверхпроводимости организована путём вывода энергии на нагрузку и её распределения по массе соленоида. Для детектирования нормальной зоны в ВТСП кабеле разработан программно-аппаратный комплекс на базе оборудования NI [3]. Ведётся модернизация комплекса для системы защиты многосекционных соленоидов. Разрабатывается система сбора данных криогенных параметров, потенциалов, и механических деформаций соленоидов. Выбрано месторасположение датчиков тензометрии и термометрии в модельном соленоиде для исследования интересующих нас физических параметров.

Испытания модельного соленоида запланированы на первую половину 2024 года. Ведётся разработка конструкции SMES, испытания которого пройдут в начале 2025 года.

1. Khodzhibagiyani H., Drobin V., Dorofeev G., Karpinskiy V., Shurygin A., Novikov M., Kashaev D., Zaslavskiy M., Kachlishvili G. An approach to development of the HTS magnet for SMES at JINR // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2020. — 07. — V. 1590. — P. 012057.
2. Матюханов Е.С. и др. Разработка ВТСП кабелей нуклотронного типа в ОИЯИ // IX Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛаПлаз-2023: Сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2023. – 440 с. ISBN 978-5-7262-2952-2.
3. Kondrat'ev V. and others. Development of the Test Facility for Measurements of Current-Voltage Characteristics of HTS Tapes, Cables and Magnets for SMES at JINR // 2022 *Physics of Particles and Nuclei Letters* 19(5):517-520.

Метод комбинирования корреляций критического теплового потока ОКБ «Гидропресс» и «НИКИЭТ» для расчета минимального запаса до кризиса теплообмена в реактивных авариях (RIA) РУ с ВВЭР

А.А. Галиев, П.В. Гордиенко, Б.Е. Шумский, А.В. Коцарев, В.В. Егоров

E-mail: galiev1aa@yandex.ru

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Одной из групп аварийных режимов, рассматриваемых при обосновании безопасности реакторных установок (РУ), является группа аварий, связанных с аномалиями реактивности и распределения мощности. Расчет части аварийных режимов этой группы аварий проводится в НИЦ «Курчатовский институт» с помощью программного комплекса ATHLET/BIPR-VVER [1] с квазитрехмерным описанием теплогидравлики и трехмерным описанием нейтронной кинетики.

Традиционно для расчета критического теплового потока (КТП) в реакторах ВВЭР используется корреляция ОКБ «Гидропресс» (корреляция Безрукова Ю.А.) [2]. Данная корреляция является принятой в отрасли при обосновании безопасности РУ с ВВЭР, однако в ходе аварийного процесса параметры теплоносителя могут выйти за пределы диапазона применимости формулы. Поэтому, в качестве корреляции, расширяющей диапазон обоснованного расчета КТП при анализе аварийных процессов, часто выступает корреляция «НИКИЭТ» (корреляция Смолина В.Н.) [3].

Открытым вопросом при использовании двух указанных корреляций является метод их комбинирования в расчетах. Возможным решением является следующий подход: использование минимального значения КТП, полученного из двух зависимостей, на всем диапазоне параметров. Целью данной работы является исследование применимости такого метода комбинирования корреляций ОКБ «Гидропресс» и «НИКИЭТ» для расчета минимального запаса до кризиса теплообмена в реактивных авариях (RIA) РУ с ВВЭР.

В работе показано, что такой метод комбинирования корреляций расширяет область обоснованного расчета КТП в реактивных авариях до диапазона применимости формулы «НИКИЭТ», не приводя к излишнему консерватизму. При таком подходе не наблюдается разрывов на графиках зависимости от времени запаса до кризиса теплообмена (DNBR) при переходе от одной корреляции к другой. Также на примере основных режимов группы реактивных аварий показано, что комбинирование корреляций ОКБ «Гидропресс» и «НИКИЭТ» оправдано с точки зрения полученного диапазона расчета КТП при расчете минимального DNBR в аварийных процессах типа RIA РУ с ВВЭР.

1. Программа ATHLET/BIPR-VVER (версия 1.0). Аттестационный паспорт № 455 от 24.10.2018.
2. Безруков Ю.А., Астахов В.И., Брантов В.Г. и др. Экспериментальные исследования и статистический анализ данных по кризису теплообмена в пучках стержней для реактора ВВЭР. – «Теплоэнергетика», 1976, № 2, с. 80-82.
3. Смолин В.Н., Поляков В.К. Методика расчета кризиса теплоотдачи при кипении теплоносителя в стержневых сборках // Семинар ТФ-78. Теплофизические исследования для обеспечения надежности и безопасности ядерных реакторов водо-водяного типа. Будапешт, 1978. С.475-486.

Разработка тестовой задачи для нестационарных расчетов реактора со свинцовым теплоносителем*А.Е. Кругликов, П.А. Пугачев, Е.В. Богданова, Е.Г. Куликов, Г.В. Тихомиров*

E-mail: kruglikovantone@gmail.com

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

В рамках форму GIF-IV [1] в настоящее время рассматривается несколько концепций быстрого реактора с свинцовым теплоносителем. Одной из концепций является Российский проект БРЕСТ-ОД-300 [2], разработка которого была начата в конце 90-х годов, а с 2021 года ведется строительство реактора, которое планируется завершить до 2030 года. Однако для данного типа реакторов существует весьма ограниченный опыт эксплуатации, а также практически отсутствуют какие-либо бенчмарки и тестовые задачи. Тем не менее для выполнения задач проектирования, лицензирования и в последствии расчетного сопровождения быстрых реакторов с свинцовым теплоносителем необходимо наличие верифицированных программ, для которых обоснована и доказана возможность их применения к реальному объекту. Важное место для верификации программных средств, применяемых для моделирования реакторных процессов занимают тестовые задачи. Кроме того, моделирование переходных процессов является неотъемлемой частью обоснования безопасности любого реактора.

В данной работе рассматривается тестовая задача для расчета переходных процессов. Тестовая задача представляет собой трехмерную упрощенную модель реактора БРЕСТ-ОД-300 с нитридным топливом (СНУП). Приводятся описание тестовой задачи и результаты расчетов изменения мощности от времени при вводе различных значений положительной и отрицательной реактивности без учета обратных связей с помощью программы Serpent, реализующей метод Монте Карло. Также приведены результаты расчетов модели с использованием в качестве теплоносителя и отражателя радиогенного свинца-208 вместо натурального свинца, использование которого рассматривается в ряде работ [3, 4] как способ повышения безопасности реактора за счет увеличения времени жизни нейтронов.

Работа выполнена в рамках Госзадания (проект FSWU-2022-0016) при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ

Работа выполнена при поддержке программы Приоритет 2030

1. GIF (2021), ANNUAL REPORT 2021, GIF, Paris, compiled by the PRPPWG and available at: https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_203440/gif-2021-ar.
2. E.O. Adamov, A.V. Kaplienko, and V.V. Orlov, "BREST lead-cooled fast reactor: from concept to technology implementation," At. Energiya, 129, No. 4, 185–194 (2020).
3. A.N. SHMELEV, E.G. KULIKOV, G.G. KULIKOV, and V.A. APSE. Lead Containing Mainly Isotope ^{208}Pb – a Neutron Moderator, Coolant and Reflector of Neutrons. Its Neutron-Physical Properties. // Proc. Int. Conf. Physics of Reactors (GLOBAL'2011), Makuhari, Japan, December 11-16, 2011.
4. G.G. KULIKOV, A.N. SHMELEV, V.A. APSE, E.G. KULIKOV and V.V. ARTISYUK. Radiogenic Lead with Dominant Content of ^{208}Pb : New Coolant and Neutron Moderator for Innovative Nuclear Facilities. // Internet Hindawi journal Science and Technology of Nuclear Installations, 2011, Article ID 252903 (2011). doi: 10.1155 /2011/252903, <http://www.hindawi.com/journals/stni/2011/252903/>.

Моделирование сигналов ЭДС в гармонических катушках при измерениях параметров магнитного поля дипольных магнитов канала транспортировки пучка «Нуклотрон-Коллайдер»

И.Ю. Николайчук¹, М.М. Шандов¹

E-mail: nikolajchuk@jinr.ru

¹*Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Канал транспортировки пучка (КТП) «Нуклотрон-Коллайдер» ускорительного комплекса NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility) [1] включает в себя 27 дипольных, 33 квадрупольных и набор корректирующих магнитов. Для измерений параметров магнитного поля дипольных магнитов разработана магнитометрическая система, основанная на методике гармонических катушек, конструктивно схожая с системой измерения дипольных магнитов бустерного синхротрона (Бустера) инжекционного комплекса NICA [2]. Методика заключается в измерении ЭДС, индуцируемой в катушке, при изменении магнитного потока, пронизывающего её площадь [3].

Кроме конструкции значительно отличаются и режимы работы дипольных магнитов Бустера и КТП. Важным отличием с точки зрения измерений является значительно большая скорость нарастания магнитного поля: 1,8 и ≈ 26 Тл/с для магнитов Бустера и КТП соответственно. Как известно [3], ЭДС, наводящаяся в катушке, пропорциональна скорости изменения магнитного потока. Для оцифровки величины ЭДС в системе сбора данных планируется использование АЦП с максимальной величиной измеряемого напряжения 42 В [4], ранее применявшихся в измерениях магнитов Бустера, что накладывает ограничение на максимально возможную скорость роста магнитного поля для выбранной геометрии катушек при проведении измерений. Целью данной работы является оценка максимальной величины ЭДС, возникающей в измерительной катушке, и возможности измерений дипольных магнитов КТП с использованием имеющейся конфигурации системы сбора сигналов.

Измерительная катушка описывается коэффициентом чувствительности к гармоникам магнитного поля [3], зависящего от порядка гармоники поля, типа катушки (радиальная или тангенциальная) и её геометрических параметров. Используя коэффициент чувствительности, построена математическая модель измерительной катушки.

Для оценки корректности модели проведено сравнение сигналов с реальной и смоделированной катушек. Результат показывает совпадение амплитуд сигналов напряжения, что указывает на возможность использования созданной модели катушки для оценки величины напряжения при измерении дипольного магнита КТП.

По результатам проведенного моделирования максимальное напряжение на измерительной катушке магнитометрической системы дипольных магнитов КТП составляет ≈ 60 В, что не позволяет использовать имеющуюся текущую конфигурацию системы сбора сигналов для измерений дипольных магнитов КТП в проектных режимах работы. Для использования имеющейся системы требуется провести изменение её конфигурации с целью понижения максимальной величины измеряемого напряжения (разработка специальных делителей, замена АЦП и т.п.).

1. Technical Project of NICA Acceleration Complex (Dubna, 2015).
2. Костромин С.А. и др. Измерение характеристик магнитного поля дипольного магнита Бустера NICA. Письма в ЭЧАЯ. 2016. Т. 13, №7. С. 1333-1342.
3. Jain A. Harmonic coils. Proc. CERN Accelerator School on Measurement and Alignment of Accelerator and Detector Magnets, April 11-17, 1997, Anacapri, Italy.
4. V. Borisov, et. al. "Magnetic measurement system for the NICA booster magnets" in Proceedings of the 5th International Particle Accelerator Conference IPAC 2014, Dresden, Germany, June 15-20, 2014, p. 2696.

Исследование основных параметров газовой экстракции и транспортировки экзотических ядер в камере отдачи продуктов реакции

Д. Симоновски^{1,2}

E-mail: simonovski.dimitar@yandex.ru

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

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

Экстракция и транспортировка экзотических ядер, полученных в различных ядерных реакциях, с помощью газовой ячейки является одним из основных методов в ядерной физике. Особый интерес представляет собой экстракция и транспортировка ядер отдачи в реакциях с тяжелыми ионами [1,2]. Одним из представителей таких газовых ячеек является RTC (Recoil transfer Chamber), установленная после газонаполненного масс-сепаратора TASCA (GSI, Darmstadt) [3]. Газовая ячейка RTC состоит из небольшого газового объёма при атмосферном давлении. Экстракция и транспортировка осуществляются газовой струёй и диффузией продуктов реакции, то есть без использования электрических полей. RTC может применяться к нелетучим элементам, что даёт перспективную возможность измерения различных физических и химических свойств сверхтяжёлых элементов [4].

В настоящей работе представлены результаты исследования основных параметров газовой транспортировки ядер в двух вариантах RTC: один с размером $40 \times 60 \times 20 \text{ mm}^3$ и другой для газовой ячейки с аксиальной симметрией.

С помощью математических расчётов и физических симуляций в программе COMSOL Multiphysics [5] были получены как временные профили экстракции, так и среднее время и эффективность транспортировки нуклидов, транспортируемых из трёх разных начальных позиций в каждом из вариантов газовой ячейки RTC до её выходного отверстия при разных относительных концентрациях He и Ar в несущем газе ($\eta_{\text{He}}=100\%$, 70%, 50%, 0%).

Также для последовательного изучения процесса газовой транспортировки после экстракции нуклидов из RTC излагаются результаты физических симуляций по определению пространственных профилей осаждения транспортируемых тяжёлых нуклидов на поверхностях системы двух параллельных кремниевых детекторов, установленной у выхода газовой ячейки, как было показано в работе [4]. В итоге излагаются выводы об оптимальных значениях параметров транспортировки для целей исследования короткоживущих сверхтяжёлых ядер с использованием двух возможных вариантов газовой ячейки RTC.

Автор выражает благодарность сотрудникам лаборатории физики экзотических ядер ПИЯФ и химического отдела SHE в институте GSI Дармштадт

1. O. Kaleja et al. The performance of the cryogenic buffer-gas stopping cell of SHIPTRAP // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. 2020. V. 463. P. 280-285.
2. Sonoda T. et al. Development of a gas cell-based laser ion source for RIKEN PALIS // Hyperfine Interactions. 2013. V. 216. P. 103-107.
3. Yakushev A. et al. First Study on Nihonium (Nh, Element 113) Chemistry at TASCA // Frontiers in Chemistry. 2021. V. 9.
4. J. Khuyagbaatar, "Island of the stability: back to the future", The Virtual SHE seminar - Program 2021, (<https://webmaster.ncbj.gov.pl/events/superheavy-elements/program-2021>).
5. COMSOL Multiphysics (URL: <https://www.comsol.com/>).

Численные модели счетчиков множественности нейтронов AWCC и RENMC

Д.А. Владимиров^{1,2}, В.Ю. Рогожкин¹, Т.Б. Алеева²

E-mail: daniilvlad95@gmail.com

¹Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А. А. Бочвара АО «ВНИИИМ», Москва, Россия

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

В настоящей работе представлены результаты моделирования методом Монте-Карло нейтронных процессов в счетчиках множественности нейтронов в программной среде SERPENT [1] на примере счетчика нейтронных совпадений AWCC и счетчика множественности нейтронов RENMC. Модели предназначены для использования в методиках измерений эффективной массы плутония-240 методом множественности нейтронов [2].

Основная задача – расчет калибровочных коэффициентов: эффективности регистрации ϵ и коэффициента отбора совпадений χ . Практическая значимость работы определяется необходимостью уменьшения количества стандартных образцов для разработки методик измерений. Актуальность работы заключается в необходимости контроля массы плутония при его вовлечении в замкнутый топливный цикл.

Построенная модель счетчика AWCC апробирована на экспериментах с разными типами источников нейтронов и путем сравнения с расчетами по программе MCNPX. Были выполнены исследования различных подходов к расчету калибровочных коэффициентов, которые позволили выбрать алгоритмы расчета.

Разработана модель счетчика множественности надтепловых нейтронов RENMC. Созданная модель апробирована на аттестованных образцах металлического плутония, стандартом образца потока нейтронов СП-1, ГСО диоксида плутония.

Результаты работы служат обоснованием применимости разработанной модели счетчика RENMC в методиках измерений эффективной массы плутония-240 для корректировки калибровочных коэффициентов. Подтверждена экспериментально наблюдающаяся зависимость калибровочных коэффициентов от вероятности поглощения нейтронов в образце (от умножения нейтронов) [3]. Использование модели позволит существенно сократить потребность в стандартных образцах. В дальнейшем полученный опыт будет использован для разработки и оптимизации новых типов детекторов множественности нейтронов.

1. JaakkoLeppänen. Serpent — a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, User's Manual, VIT Technical Research Centre of Finland, 2015.
2. Ensslin N., Harker W., Krick M. e.a. Application Guide to Neutron Multiplicity Counting. LA-13422-M, 1998.
3. Горбунова А. Ю., Калибровочные коэффициенты в модели суперделений метода множественности нейтронов / А.Ю. Горбунова, В.Ю. Рогожкин // Атомная энергия. – 2022. - т. 132, вып. 3. – С. 170 – 174.

**Разработка системы управления магнитными линзами
синхроциклотрона (СЦ-1000) НИЦ «Курчатовский институт» –ПИЯФ**

Д.С. Новосельцев^{1,2}, А.И. Халиков¹, И.А. Болдырев^{1,2}

E-mail: novoselcev_ds@pnpi.nrcki.ru

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

² *ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», г. Воронеж, Россия*

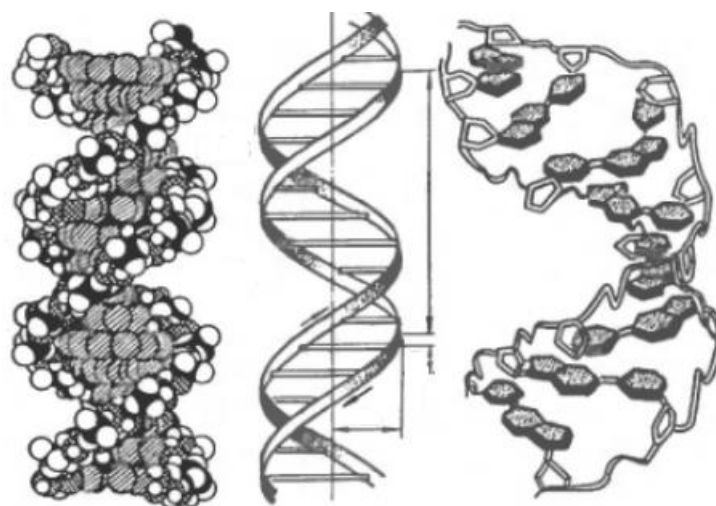
Одной из базовых установок Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт» –ПИЯФ) является протонный синхроциклотрон СЦ-1000, введенный в действие в 1970 году. На его базе проводятся: исследования в области физики атомного ядра и частиц, а также ядерно-медицинские исследования. Энергия протонов, генерируемых ускорителем, составляет 1000 МэВ с интенсивностью выведенного протонного пучка 1 мкА [1].

Протонный пучок, сформированный в камере ускорителя, движется по тракту до мишени [2]. Для успешной транспортировки ускоренных частиц без потери пучка, используются магнитные линзы, которые задают траекторию движения пучка. Изменение траектории позволяет использовать ускоритель СЦ-1000 для нескольких научно-исследовательских установок [3].

На данный момент настройка магнитных линз производится вручную. Разрабатываемое программное обеспечение предназначено для управления токами на магнитных элементах выходных трактов синхроциклотрона СЦ-1000 и возможностью аварийного выключения питания. Заложено отображение данных конфигураций магнитных элементов, сигналов обмена с блоком системы стабилизации, сигналов блока стабилизации тока магнитных элементов и вывод гистограммы напряжения на шунте с момента включения режима стабилизации рабочей точки для оценки уровня наводок в измерительной цепи. Для контроля и последующего анализа программа будет вести протокол работы с момента запуска куда записываются события, связанные с установкой и выключением тока, а также сообщения об ошибках в работе системы.

1. Абросимов Н.К., Михеев Г.Ф. Радиотехнические системы синхроциклотрона Петербургского института ядерной физики / Под науч. ред. Г.А. Рябова. – Гатчина Ленинградской обл.; Издательство ФГБУ «ПИЯФ», 2012. - 340 с.
2. Комар Е.Г. Основы ускорительной техники. М., Атомиздат, 1975, с. 368.
3. В. И. Светцов. Вакуумная и плазменная электроника: Учеб. пособие /; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. Иваново, 2003. 172 с. ISBN 5-230-01605-1.

БИОФИЗИКА, БИОМЕДИЦИНА, ГЕНЕТИКА



Оценка изменения количества белковых продуктов гена *Nxf1* в процессе эмбриогенеза *Drosophila melanogaster*

***К.В. Ахромов*^{1,2}, *Е.В. Голубкова*¹, *С.В. Саранцева*²**

Email: ahromov.kv@gmail.com

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

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

Nxf1 (nuclear export factor) – эволюционно консервативный ген из семейства *Nxf*, члены которого обнаруживаются у всех представителей заднежутиковых [1]. Функция белка NXF1 – ядерно-цитоплазматический транспорт мРНК. NXF1 связывается с белком NXT1 (NTF2-related export protein 1) и работает в форме гетеродимера. NXF1 состоит из пяти функциональных доменов: NLS (nuclear localization signal), RBD (RNA-binding domain), необходимый для белок-белковых взаимодействий LRRs (Leucine-rich repeats), NTF2-like и UBA-like (ubiquitin associated-like). NTF2-like домен отвечает за взаимодействие с NTF2 (nuclear transport factor 2), что необходимо для выхода транспортируемого комплекса через ядерную пору; UBA-like необходим для связывания с нуклеопоринами [2].

Известно, что ген *Nxf1* имеет не менее пяти транскриптов, возникающих при альтернативном сплайсинге [3].

Целью данной работы является определение различия в количестве изоформ белкового продукта гена *Nxf1* на разных стадиях эмбриогенеза *Drosophila melanogaster*.

Для решения этой задачи использовался метод Western-blot с антителами к N-концу белка NXF1. По ранее полученным данным известно, что для эмбрионов характерен укороченный транскрипт, однако в предыдущих работах не проверялось, в каком возрасте начинает обнаруживаться соответствующий транскрипт.

В результате работы было обнаружено накопление укороченного транскрипта на пятый час развития эмбриона, что соответствует стадии закладки нервной системы. Это может означать, что укороченная изоформа белка NXF1 играет важную роль в развитии нервной системы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Курчатовского геномного центра – ПИЯФ грантом № 075-15-2019-1663

1. Herold, A., Suyama, M., Rodrigues, J.P., Braun, I.C., Kutay, U., Carmo-Fonseca, M., Bork, P., Izaurralde, E. (2000). TAP (NXF1) belongs to a multigene family of putative RNA export factors with a conserved modular architecture. *Mol. Cell. Biol.* 20(23): 8996--9008.
2. Braun IC, Herold A, Rode M, Izaurralde E. Nuclear export of mRNA by TAP/NXF1 requires two nucleoporin-binding sites but not p15. *Mol Cell Biol.* 2002 Aug;22(15):5405-18. doi: 10.1128/MCB.22.15.5405-5418.2002.
3. Ivankova N, Tretyakova I, Lyozin GT, Avanesyan E, Zolotukhin A, Zatsepina OG, Evgen'ev MB, Mamon LA. Alternative transcripts expressed by small bristles, the *Drosophila melanogaster* *nxf1* gene. *Gene.* 2010 Jun 15;458(1-2):11-9. doi: 10.1016/j.gene.2010.02.013. Epub 2010 Mar 7.

Формирование многокомпонентных систем с биологически активными агентами и наночастицами благородных металлов*Д.А. Артамонова, Н.А. Касьяненко*

E-mail: st077204@student.spbu.ru

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

Нанотехнологические разработки последнего времени показали, что нуклеиновые кислоты представляют интерес для создания различных структур, используемых в современной терапии рака [1]. Комплексы с нуклеиновыми кислотами могут быть использованы и как инструмент для доставки лекарств. Полиэлектролитная природа нуклеиновых кислот, ответственная за набухание макромолекул в водной среде, препятствует их прониканию в клетки. Это можно минимизировать путем компактизации ДНК, индуцированной использованием положительных компактизирующих ДНК агентов. Включение в компактные частицы ДНК-полимер наночастиц металлов может расширить область применения таких структур в медицине. Наночастицы серебра и золота обладают универсальными плазмонными свойствами, низкой цитотоксичностью, они биосовместимы и имеют регулируемый размер, что делает их подходящими для использования в формировании средств доставки лекарств в клетки-мишени [2].

Целью данной работы было формирование систем, содержащих высокомолекулярную ДНК, компактизирующий ее полимер, наночастицы металлов и люминофор.

Использовали коммерческий препарат высокомолекулярной ДНК тимуса теленка фирмы Sigma Aldrich. Полимер МАГ-ДМАЭМ с включенными наночастицами серебра был синтезирован Золотовой Ю.И. в ИВС РАН. Отношение молярной концентрации мономерных звеньев полимера к молярной концентрации соли AgNO_3 в растворе при восстановлении серебра было равно 9.

В работе показано, что компактизация ДНК в растворе малой ионной силы с использованием катионного сополимера МАГ-ДМАЭМ с включенными наночастицами серебра принципиально не отличается от наблюдаемой компактизации при использовании такого же сополимера без наночастиц. Спектры флуоресценции EtBr для комплексов ДНК-полимер- Ag_0 при разных соотношениях мономерных звеньев полимера к фосфатным группам ДНК показывают, что после $N/P > 1$ интенсивность люминесценции красителя существенно снижается. Для красителя доступ к ДНК в составе компактных частиц падает. В случае связывания EtBr с ДНК до компактизации интенсивность люминесценции красителя существенно возрастает с увеличением величины N/P .

Была получена система, сформированная путем восстановления наночастиц золота непосредственно на ДНК с ее последующей компактизацией сополимером. Такие структуры содержали два вида наночастиц, характерные пики плазмонного резонанса которых были зафиксированы в видимой области спектра. Сравнение результатов вискозиметрии для приготовленных растворов, в том числе и растворов ДНК, компактизованной полимером, связанным с наночастицами серебра, показало, что формируемые структуры находятся в компактном состоянии. Унимодальная функция распределения частиц по размерам, полученная методом ДРС, показывает, что сформированные компактные структуры ДНК-полимер с включением наночастиц металлов, имеют радиус порядка 90-100 нм. Таким образом, мы можем формировать компактные ДНК-полимерные наночастицы с включением наночастиц металлов, размер которых позволяет проникать им через клеточные мембраны.

1. Wu X. et al. Gene therapy based on nucleic acid nanostructure //Advanced Healthcare Materials. – 2020. – Т. 9. – №. 19. – С. 2001046.
2. Patil S. et al. The development of functional non-viral vectors for gene delivery//International journal of molecular sciences. – 2019. – Т. 20. – №. 21. – С. 5491

***В.С. Артемова¹, И.Р. Назаров¹, Д.О. Обухова¹, В.М. Кудринская¹, В.В. Киренская¹,
Т.В. Тютюнник¹***

E-mail: lerochek1999@gmail.com

¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург, Россия

Болезнь Паркинсона (БП) - одно из самых серьезных нейродегенеративных заболеваний, которое не поддается лечению. С помощью существующих в настоящее время лекарств можно только купировать симптомы БП [1]. При БП наблюдается гиперактивация кальпаинов, которые представляют собой семейство Ca²⁺-зависимых нейтральных цистеиновых протеаз, экспрессируемых во всех типах клеток. В ЦНС основные представители: кальпаин-1 и кальпаин-2 [2]. Л-ДОФА - основной препарат, используемый при лечении, обладает большим количеством побочных эффектов, и поэтому актуальна разработка комбинированных схем. В данной работе был выбран препарат кальпастатин (CAST), который является селективным ингибитором кальпаина-1 и кальпаина-2 и не влияет на активность других протеаз.

Работа была выполнена на 25 крысах-самцах линии Вистар массой 280-330 граммов, содержащихся в стандартных условиях (5 групп n=5: 1 - контрольная, 2 - ложно-оперированные, 3 - с введением МФТП, 4 - МФТП + лечение Л-ДОФА, 5 - МФТП + лечение Л-ДОФА + лечение CAST). В эксперименте были использованы следующие активные препараты: МФТП (однократно интрацеребрально в область черной субстанции в 1-й день 0,0025 мг), Л-ДОФА (интрагастрально суспензию препарата "Синдопа" с концентрацией Л-ДОФА 100 мг/кг) и кальпастатин (в концентрации 5 мкг/кг интраназально). Введение препаратов Л-ДОФА и кальпастатин проводилось ежедневно с 8-го по 35-й день эксперимента включительно. Тест "Активное избегание" (АИ), необходимый для оценки когнитивных функций был проведен на 7-й, 14-й и 21-й дни после операции. Статистическая обработка данных проводилась с использованием программы GraphPad Prism. Сравнение проводилось с использованием двустороннего дисперсионного анализа с последующим применением post hoc критерия Тьюки ($p \leq 0,05$).

Тест АИ показал, что на 7-й день эксперимента среднее количество правильных попыток 1 группы было меньше, чем на 21-й день для этой группы ($p < 0,0001$). На 7-й день эксперимента количество правильных попыток для 5 группы меньше, чем на 14-й день для этой группы ($p = 0,0377$) и меньше, чем на 21-й день ($p = 0,0377$). На 7-й день эксперимента различий между группами выявлено не было. На 14-й день количество правильных попыток в 1 группе было больше, чем в 3 группе ($p = 0,0083$). На 14-й день количество правильных попыток в 1 группе было больше, чем в 2 группе ($p < 0,0001$). На 14-й день количество правильных попыток в 3 группе было меньше, чем в 5 группе ($p < 0,0001$). На 14-й день количество правильных попыток в 4 группе было меньше, чем в 5 группе ($p = 0,0476$). На 21-й день количество правильных попыток в 1 группе было больше, чем в 2 группе ($p < 0,0001$), чем в 3 группе ($p < 0,0001$), чем в 4 группе ($p = 0,0039$). На 21-й день количество правильных попыток в 2 группе было меньше, чем в 5 группе ($p = 0,0341$). На 21-й день количество правильных попыток в 3 группе было меньше, чем в 5 группе ($p = 0,0001$). На 21-й день количество правильных попыток в 4 группе было меньше, чем в 5 группе ($p = 0,0034$).

Согласно тесту, "Активное избегание", добавление кальпастатина к терапии в дозировке 5 мкг/кг в дополнение к введению Л-ДОФА в концентрации 100 мг/кг приводит к заметному улучшению когнитивных функций.

1. Simon D.K., Tanner C.M., Brundin P. Parkinson Disease Epidemiology, Pathology, Genetics, and Pathophysiology // Clin Geriatr Med, 2020. Vol. 36, № 1. P. 1–12.
2. Kotova I.M. et al. Functions and distribution of calpain-calpastatin system components in brain during mammal ontogeny // Biochim Biophys Acta Gen Subj, 2023. Vol. 1867, № 5.

Потенциальные фармакологические шапероны глюкоцереброзидазы: виртуальный скрининг и оценка эффективности на первичной культуре макрофагов человека

Е.А. Белых¹, Г.Н. Рычков¹, А.Э. Копытова^{1,2}, М.А. Николаев^{1,2}, А.Д. Изюмченко^{1,2}, С.Н. Пчелина^{1,2}, А.К. Емельянов^{1,2}

E-mail: evgene.ya@yandex.ru

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

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

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 наследственного заболевания болезни Гоше (БГ) [1]. Всё больше обсуждается использование фармакологических шаперонов (ФС) глюкоцереброзидазы (ГЦ) для терапии как GBA-БП, так и нейропатических форм БГ.

Целью исследования являлся виртуальный скрининг среди одобренных к применению лекарственных препаратов потенциальных аллостерических шаперонов мутантной формы N370S ГЦ, а также оценка их способности проникать через гематоэнцефалический барьер (ГЭБ), влияния на активность ГЦ и поиск максимально нетоксичной концентрации на первичной культуре макрофагов человека.

На текущем этапе работы был продолжен поиск потенциальных фармакологических шаперонов с использованием метода молекулярного докинга на атомарной модели ГЦ, построенной нами ранее [1,2]. В исследование были включены 4178 одобренных к применению в клинической практике химических соединений. В результате были отобраны 52 соединения, обладающих наименьшей величиной расчётной оценочной функции, характеризующей сродство к белку. У 12 соединений, приём которых в клинической практике возможен длительное время, была проверена способность проникать через ГЭБ с помощью прогнозируемого веб-сервера ADMET. Для препаратов Benfotiamine, Rebamipide, Glutathione проведен поиск максимальной нетоксичной концентрации на первичной культуре макрофагов здорового добровольца, культивируемых в стандартных условиях (5% CO₂, 37 °C), с использованием набора MTS (Promega, США). Из всех препаратов наибольшая вероятность проникновения через ГЭБ оказалась у Acetaminosalol (44%), Almitrine (39%) и Benfotiamine (13%). Максимальная нетоксичная концентрация для Benfotiamine, Glutathione, Rebamipide составила 10, 10, 2 мкМ, соответственно. Из этих трех препаратов для Benfotiamine показана его способность увеличивать активность ГЦ на первичной культуре макрофагов здорового донора в указанной концентрации.

Таким образом, в результате исследования предложено 12 потенциальных фармакологических шаперонов ГЦ, а также на первичной культуре макрофагов человека показана способность препарата Benfotiamine повышать активность ГЦ.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №22-25-00721. Вычисления проводились с использованием ресурсов суперкомпьютерного центра СПбПУ Петра Великого

1. Копытова АЕ 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. Николаев М.А. и др. Репозиционирование методом виртуального скрининга одобренных к применению лекарственных препаратов потенциальных фармакологических шаперонов глюкоцереброзидазы человека // Сборник тезисов IX Всероссийского молодёжного научного форума с международным участием "Open Science". – Гатчина.

УДК: 577.2

Дозозависимое влияние ингибитора протеинкиназы mTOR на активность лизосомных гидролаз и концентрацию их субстратов в первичной культуре макрофагов периферической крови человека

А.И. Безрукова^{1,2}, К.С. Башарова¹, Г.В. Байдакова³, Е.Ю. Захарова³, С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.С. Усенко^{1,2}
E-mail: bezrukova_ai@pnpi.nrcki.ru

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

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

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

Путь PI3K/AKT/mTOR регулирует много процессов в клетке, в том числе лизосомную функцию и аутофагию. Использование ингибитора протеинкиназы mTOR, который улучшает биогенез лизосомы, может быть рассмотрено как потенциальный терапевтический агент для лечения нозологий, связанных с дисфункцией лизосомного фермента β -глюкоцереброзидазы (GCase) и нейродегенерацией [1]. При ингибировании активности mTOR важно поддерживать баланс между активацией передачи сигналов mTOR и лизосомной функцией, так как гипер- и гипоактивация активности mTOR может приводить к дисфункции лизосом и последующей гибели клеток [2].

Цель настоящего исследования: оценить дозозависимое влияние селективного ингибитора mTOR – Torin 1 в первичной культуре макрофагов периферической крови (ПКМПК) человека на активность лизосомных гидролаз и концентрацию их субстратов.

Активности ферментов (GCase, альфа-галактозидаза (GLA), кислая сфингомиелиназа (ASMase), галактозилцереброзидаза (GALC)) и концентрации сфинголипидов (глоботриаозилсфингозин (LysoGb3), сфингомиелин (LysoSM), гексозилсфингозин (HexSph)) оценивали в ПКМПК, полученной от 4 индивидуумов контрольной группы и культивируемой в присутствии ингибитора mTOR – Torin 1 в концентрациях 25 нмоль, 50 нмоль, 100 нмоль, 150 нмоль, 200 нмоль, методом высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией. Выживаемость ПКМПК в присутствии Torin 1 оценивали коммерческим набором CellTiter 96 AQueous One Solution Cell Proliferation Assay. Эффективность ингибирования Torin 1 оценивали по уровню белка phospho-mTOR методом вестерн-блоттинга.

Наблюдалось снижение активности GCase, GLA, ASMase, GALC при концентрациях Torin 1 25 нмоль, 50 нмоль и снижение активности GCase, GLA, ASMase, GALC и уровня LysoGb3, LysoSM при концентрациях Torin 1 150 нмоль, 200 нмоль в ПКМПК по сравнению с необработанными клетками ($p < 0.05$). Выявлено отсутствие достоверных изменений в активности GCase, GLA, ASMase, GALC и уровне LysoGb3, LysoSM в ПКМПК в присутствии ингибитора Torin 1 в концентрации 100 нмоль по сравнению с необработанными клетками ($p > 0.05$). Достоверных изменений в уровне HexSph при обработке Torin1 во всех исследуемых концентрациях выявлено не было ($p > 0.05$).

Ингибитор mTOR – Torin 1 в концентрациях 25 нмоль, 50 нмоль, 150 нмоль, 200 нмоль влияет на активность лизосомных гидролаз и концентрацию сфинголипидов. Концентрация 100 нмоль не приводит к изменению исследуемых параметров в ПКМПК контрольной группы, что может свидетельствовать о достижении баланса активности mTOR и лизосомной активности в клетках при данной концентрации ингибитора Torin 1.

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

1. Brown R.A. et al. mTOR hyperactivity mediates lysosomal dysfunction in Gaucher's disease iPSC-neuronal cells// Dis Model Mech. 2019. V. 12. No. 10. P. dmm038596.
2. Zhu Z. et al. Balancing mTOR Signaling and Autophagy in the Treatment of Parkinson's Disease // Int J Mol Sci. 2019. V. 20. No. 3. P. 728.

Усовершенствованная система детектирования полипептидов

М.С. Биджиева^{1,2}, О.А. Толичева¹, В.И. Марина^{3,4}, В.Е. Сагитова⁴, О.А. Донцова^{3,4,5,6}, П.В. Сергиев^{3,4,5,7}, Е.В. Полесскова^{1,2}, А.Л. Коневега^{1,2,8}

E-mail: bidzhieva_ms@pnpi.nrcki.ru

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

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

³Сколковский институт науки и технологий, Сколково, Россия

⁴Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁵Научно-исследовательский институт физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, Москва, Россия

⁶Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова Российской академии наук, Москва, Россия

⁷Санкт-Институт функциональной геномики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁸Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Биосинтез белка, или трансляция представляет собой сложный многостадийный процесс, изучение которого имеет фундаментальное и практическое значение. Существует ряд методов для анализа основных этапов трансляции. Однако многие из них имеют ограничения и недостатки, поэтому актуальной задачей является оптимизация существующих и разработка новых методов исследования биосинтеза белка.

Метод радиоактивного мечения, рутинно использовавшийся для анализа биосинтеза белка и механизмов действия ингибиторов трансляции на протяжении десятилетий, постепенно вытесняется использованием стабильных флуорофоров. В данной работе представлен простой и быстрый способ анализа поэтапного синтеза полипептида с использованием флуорофора BODIPY при помощи электрофоретического разделения пептидов в полиакриламидном геле в денатурирующих условиях [1-3]. Использование BODIPY-меченой инициаторной метионил-тРНК в реконструированной *in vitro* системе трансляции позволило нам визуализировать пошаговый синтез пептидов. Адекватность и эффективность работы системы были подтверждены контрольными экспериментами с использованием радиоактивных меток и ингибиторов биосинтеза белка с известными механизмами действия.

Описанный метод позволяет анализировать различные этапы синтеза белка, а также изучать механизмы работы ингибиторов трансляции. Уникальной особенностью разработанной системы является ее сверхвысокая чувствительность с порогом детектирования в области 0,1 пмоль полипептида. Среди остальных преимуществ метода стоит отметить его простоту использования, короткую длительность эксперимента, дешевизну и экологичность.

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

1. Treibs A., Kreuzer F. H. Difluorboryl-komplexe von di-und tripyrrylmethenen //Justus Liebigs Annalen der Chemie. – 1968. – Т. 718. – №. 1. – С. 208-223.
2. Yang L. et al. Some observations relating to the stability of the BODIPY fluorophore under acidic and basic conditions //Dyes and Pigments. – 2011. – Т. 91. – №. 2. – С. 264-267.
3. Summer H., Grämer R., Dröge P. Denaturing urea polyacrylamide gel electrophoresis (Urea PAGE) //JoVE (Journal of Visualized Experiments). – 2009. – №. 32. – С. e1485.

Перспективы применения прямой фотогенерации синглетного кислорода ИК-лазером в терапии солидных опухолей: цитотоксический и тепловой эффекты

А.А.Богданов¹, Ан.А. Богданов¹, В.В. Клименко¹, Н.А. Верлов², В.С. Бурдаков^{1,2}

E-mail: burdakov_vs@pnpi.nrcki.ru

¹ ГБУЗ «Санкт-Петербургский клинический научно-практический центр специализированных видов медицинской помощи (онкологический) имени Н.П. Напалкова», Санкт-Петербург, Россия

² ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

На сегодняшний день фотосенсибилизированная генерация синглетного кислорода (фотодинамическая терапия, ФДТ) является дополнительным перспективным малоинвазивным методом лечения солидных опухолей, но обладает рядом клинических побочных эффектов [1,2]. Методы прямой фотогенерации синглетного кислорода в тканях инфракрасными (ИК) лазерами могут стать эффективной альтернативой ФДТ [3]. Цель настоящей работы состояла в оценке цитотоксического эффекта ИК лазерного излучения 1273 нм на опухолевых клеточных линиях при использовании сфокусированного лазерного пучка для минимизации тепловых эффектов, а также определении эффективных режимов облучения широким пучком на биоимитирующем геле, не приводящих к разогреву до биокритических температур.

В настоящей работе было показано, что облучение опухолевых клеток сфокусированным лазерным пучком 1273 нм и диаметром 100-1000 мкм достоверно приводит к цитотоксическому эффекту в зоне облучения, не вызванному термическим воздействием. Были определены пороговые дозы для 100 % гибели опухолевых клеток: 700 и 1100 кДж/см² для HeLa и K562, соответственно. На основе экспериментальных данных были рассчитаны кумулятивные концентрации синглетного кислорода, приводящие к клеточной гибели: ЛД50 для клеток HeLa ~ 1000мкМ, K562 ~ 3000мкМ. В результате численного моделирования были рассчитаны импульсные режимы облучения, не приводящие к разогреву до биокритических температур, но позволяющие получать цитотоксические количества синглетного кислорода. На биоимитирующем геле было показано, что наиболее эффективный рассчитанный режим облучения (средняя плотность мощности ~ 1 Вт/см², пиковая плотность мощности 20 Вт/см², время импульса $\tau=25$ мс, скважность 20) не приводит к разогреву места воздействия выше 42,5°C. Полученные результаты являются необходимым основанием дальнейшего исследования прямой фотогенерации синглетного кислорода в биоткани с целью разработки инновационных методов терапии солидных опухолей и внедрения их в практическую онкологию.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-25-20050, <https://rscf.ru/project/22-25-20050/>, и гранта Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с Соглашением от 15 апреля 2022 г. № 51/2022

1. Allison R.R., Sibata C.H. Oncologic photodynamic therapy photosensitizers: a clinical review // Photodiagnosis Photodyn Ther. – 2010. – Vol. 7, № 2. – P. 61–75.
2. Correia J.H., Rodrigues J.A., Pimenta S., Dong T., Yang Z. Photodynamic Therapy Review: Principles, Photosensitizers, Applications, and Future Directions // Pharmaceutics. – 2021. – Vol. 13, № 9.
3. Аккалаева А.Э., Клименко В.В., Аванесян А.А., Егоренков В.В., Богданов А.А., Моисеенко В.М. Возможности применения внутрипросветной фотодинамической терапии в онкологии (обзор) // Практическая онкология. – 2022. – Т. 23, № 2. – С. 100–108.

Сравнение подходов оценки изменения метаболитов для ранней диагностики развития гибридомы

А.С. Быков^{1,2}, А.Е. Егоров², Н.М. Панкратова³, А.Н. Панкратов³, М.В. Молчанов², А.С. Чернов⁴,
М.А. Тимченко^{2,5}

E-mail: artemb209@gmail.com

¹Обнинский институт атомной энергетики - филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Обнинск, Россия

²Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия

³Институт математических проблем биологии РАН - филиал Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Пущино, Россия

⁴Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Пущино, Россия

⁵Институт биологического приборостроения ФИЦ ПНЦБИ РАН, Пущино, Россия

Одна из важных задач современной медицины - раннее обнаружение онкологических заболеваний. Хорошим прогностическим потенциалом обладают биологические жидкости, большая часть методов определения риска заболевания основана на анализе конкретных метаболитов в них, изменение концентрации которых могут служить сигналом о различных нарушениях в организме. ЯМР-спектроскопия [1,2] – перспективный метод для определения метаболитов. Он позволяет одновременно обнаружить до 70 метаболитов в спектре, что помогает выявить изменения, связанные с патологией, и оценить эффективность лечения.

Целью настоящей работы является сравнение эффективности дифференцировки групп здоровых и привитых гибридомой мышей с помощью целевого и нецелевого подхода на основании исследования образцов плазмы крови методом протонной ЯМР-спектроскопии.

Для исследования использовались две группы самок мышей линии BALB/c по 10 особей в каждой: контрольная и с перевитой гибридомой. Кровь для получения плазмы брали из орбитальных синусов за 3 дня до привития гибридомы, на 1-й, 2-й, 3-й, 5-й, 7-й, 9-й и 11-й день после привития. Образцы плазмы крови анализировали на ЯМР-спектрометре Bruker Avance 600 MHz. Полученные ЯМР-спектры анализировались в программном пакете metabom8 [3] с помощью метода главных компонент (МГК), который показал, что уже на следующий день после привития гибридомы, группа здоровых мышей, которым вводили физраствор, и группа с гибридомой хорошо разделились, что можно объяснить иммунным ответом. Со 2-го по 5-й день группы уже не показывали разительных отличий, но, начиная с 7-го дня (2 стадия рака), уже хорошо разделялись. С помощью AMIX (Bruker) количественно определены 34 метаболита. Благодаря U-критерию Манна-Уитни и ROC-кривым были выделены метаболиты, достоверно различающиеся при развитии опухоли между контрольной и больной группой, уже на 5-й день (2 стадия рака) достоверно отличаются 7 метаболитов. На данных основании построены графики МГК. Было обнаружено, что при таком целевом подходе группы дифференцируются в первый день после привития гибридомы несколько хуже, чем при анализе спектров в metabom8, однако в остальные дни графики МГК практически идентичны.

Таким образом, metabom8 позволяет уловить мельчайшие изменения в спектре на ранних стадиях благодаря рассмотрению всего спектра целиком, а не отдельных метаболитов. Оба метода, нецелевой с применением metabom8 и целевой с определением метаболитов, показали, что видимые изменения, которые позволяет детектировать ЯМР-спектроскопия в случае гибридомы, появляются на 2 стадии рака.

1. Vignoli A. et al. // *Angewandte Chemie (International ed. in English)*. 2019. 58(4), P. 968–994.
2. Larkin J.R. et al. // *Clin Cancer Res*. 2022. 28(8), P. 1651-1661.
3. <https://github.com/tkimhofer/metabom8>

Исследование динамики содержания биологически активных веществ, антиоксидантной и антимикробной активности в бурых водорослях *Fucus vesiculosus* с побережья Баренцева моря в зависимости от сезона года

Ф.К. Ермилов^{1,3}, И.М. Лапина^{1,2}, Е.В. Журишкина^{1,2}, А.А. Кульминская^{1,2}

E-mail: ermilov.filipp03@gmail.com

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

²Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

В последние годы все большее внимание уделяется бурым водорослям как источнику биологически активных соединений, таких как сульфатированные полисахариды (фукоиданы), альгинаты, фукоксантины, а также полифенолы, которые являются мощными антиоксидантами и могут оказывать благотворное воздействие на здоровье человека.

Бурые водоросли, как и все живые организмы, адаптируются к среде обитания, её условиям, а также имеют собственный жизненный цикл, который характеризуется накоплением тех или иных биологически активных веществ. На состав и содержание биологически активных соединений в водорослях могут оказывать существенное влияние сезонные условия и географическое расположение, доступность солнечного света и CO₂, наличие питательных веществ и количество солей в среде обитания, pH и температура морской воды, океанические течения, волны и другие факторы [1].

Основная цель исследования заключается в определении воздействия сезонных изменений на состав ценных биологически активных соединений, таких как полифенольные компоненты и сульфатированные полисахариды, в бурых водорослях *Fucus vesiculosus*, собранных в прибрежных зонах Баренцева моря. Параллельно, целью является оценка сезонной изменчивости антимикробной и антиоксидантной активности данных компонентов, выделенных из водорослей.

Актуальность исследования обуславливается имеющимися данными об уникальных свойствах биологически активных компонентов, находящихся в бурых водорослях *Fucus vesiculosus*. Данные биологически активные вещества обладают выраженной антибактериальной и антиоксидантной активностью, а также могут использоваться в качестве функциональных добавок в пищевых продуктах и фармацевтических препаратах [2].

Для оптимизации временных затрат и увеличения экономического потенциала применения результатов проекта в промышленности, была разработана двухступенчатая методика извлечения полифенольных веществ и полисахаридов из водорослей *Fucus vesiculosus* [3]. Также были определены показатели биологической активности выделенных веществ, а именно антиоксидантная и антимикробная активность.

На бактериях вида *E. coli* было проверено наличие антимикробной активности и помимо этого, методом DPPH, основанном на способности антиоксидантов исходного сырья связывать стабильный хромоген радикал 2,2-дифенил-1-пикрилгидразил (DPPH), была определена антиоксидантная активность экстрагированных полифенольных соединений и полисахаридов.

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

1. Catarino M., Silva A., Cardoso S. Phytochemical Constituents and Biological Activities of *Fucus* spp. // *Marine Drugs*. 2018. № 8 (16). С. 249.
2. Pádua D. [и др.]. Bioactive compounds from brown seaweeds: Phloroglucinol, fucoxanthin and fucoidan as promising therapeutic agents against breast cancer // *Phytochemistry Letters*. 2015. (14). С. 91–98.
3. Gupta S., Abu-Ghannam N. Bioactive potential and possible health effects of edible brown seaweeds // *Trends in Food Science & Technology*. 2011. № 6 (22). С. 315–326.

Модификация методики пробоподготовки нейтрофилов периферической крови для исследования спектрально-оптическими методами

Н.Д. Федорова¹, А.В. Соколов², А..П. Трашков^{1,3}, Е.Ю. Варфоломеева¹

E-mail: fedorova_nd@pnpi.nrcki.ru

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

²ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Нейтрофилы являются наиболее многочисленными клетками системы врожденного иммунитета, вызывающими активный интерес исследователей в последние годы. Долгое время они воспринимались исключительно как фагоцитарные клетки [1], но сейчас накоплено множество исследований, расширяющих понимание функций нейтрофилов [2]. Поскольку нейтрофилы чрезвычайно чувствительны к микроокружению [3,4], существует потребность в протоколах пробоподготовки, обеспечивающих максимально естественные условия для исследуемых клеток. В данной работе предлагается способ подготовки образца нейтрофилов периферической крови для исследования спектрально-оптическими методами.

Периферическую кровь в вакуумных гепариновых пробирках Lind-Vac (Estonia) центрифугировали при 252 g в течение 15 минут при комнатной температуре. После этого, плазму переносили в отдельную пробирку и центрифугировали при тех же условиях, чтобы избавиться от тромбоцитов. Белый слой лейкоцитов с небольшим количеством эритроцитов соединяли с отцентрифугированной плазмой в новой пробирке и окрашивали Hoechst 33342 (10 мкг/мл). Целью окрашивания было визуальное отделение нейтрофилов от прочих клеток крови на основе морфологии флуоресцентно окрашенных ядер. Далее, суспензию клеток помещали на поверхность оптической чашки Петри для конфокальной микроскопии, предварительно обработанную 0,001% раствором поли-L-лизина (Sigma-Aldrich, Merck) в течение 3-4 часов. После 30-40 минут инкубации, необходимых для адгезии нейтрофилов к поверхности, образец готов к эксперименту. Избыток эритроцитов аккуратно удаляли и заполняли чашку Петри отцентрифугированной плазмой крови.

Такая схема пробоподготовки обеспечивает большую нативность условий проведения эксперимента по сравнению с наиболее распространенным методом выделения нейтрофилов из периферической крови центрифугированием на градиенте фиколла, так как изучаемые клетки вплоть до непосредственного исследования на конфокальном либо сканирующем ион-проводящем микроскопе находятся в цельной крови и подвергаются меньшему стрессу в процессе пробоподготовки (благодаря отсутствию центрифугирования на градиенте фиколла). Кроме лучшего сохранения близкой к естественной функциональной активности нейтрофилов, разработанная модификация процесса подготовки образцов увеличивает их жизнеспособность, что дает возможность более длительного наблюдения за функционированием клеток.

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

1. Nordenfelt P. and Tapper H. Phagosome dynamics during phagocytosis by neutrophils. *J. Leukoc. Biol.* 2011; 90:271-84.
2. Mozzini C., Girelli D. The role of neutrophil extracellular traps in Covid-19: only a hypothesis or a potential new field of research? *Thromb Res.* 2020; 191: 26–7.
3. Varfolomeeva EY et al. Ceruloplasmin decreases respiratory burst reaction during pregnancy. *Free Radic Res.* 2016; 50:909-19.
4. Федорова Н.Д. и др. Вирусные инфекции влияют на функциональную активность нейтрофилов периферической крови. *Актуальные вопросы биологической физики и химии.* 2021; 6(1):115-123.

Экзосомоподобные везикулы грейпфрута - эффективные доставщики терапевтического экзогенного HSP70 к опухолевым клеткам

Л.А. Гараева¹, Е.Ю. Комарова², С.С. Емельянова¹, И.В. Гужова², Б.А. Маргулис², А.Л.Конева^{1,3,4},
Т.А. Штам^{1,2,3}

E-mail: garaeva_laa@pnpi.mrcki.ru

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

²Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва

⁴ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», Санкт-Петербург, Россия

Одним из перспективных направлений в терапии опухолевых новообразований считается активация противоопухолевого иммунитета, в частности на основе белков теплового шока [1]. Существует парадигма, согласно которой экзогенный белок-шаперон HSP70 способствует экстружии эндогенного HSP70 в комплексе со специфическими опухолевыми белками на поверхность клеток и во внеклеточное пространство, что приводит к обнаружению таких комплексов антиген-презентирующими клетками, процессингу антигенов, активации цитотоксических лимфоцитов и натуральных киллеров (NK-клетки) [2]. В свою очередь, эффективная доставка HSP70 к клеткам опухоли могла бы быть осуществлена при помощи растительных везикул. Цель данной работы – оценка возможности использования нагруженных экзогенным HSP70 везикул, полученных из сока грейпфрута (GEVs), для активации противоопухолевого иммунного ответа на клеточных и животных моделях.

Полученные методом ультрацентрифугирования GEVs были нагружены экзогенным HSP70 методом со-инкубации с обработкой ультразвуком и добавлены к клеткам меланомы (B16) и карциномы (СТ-26) мыши. Спустя 18 часов со-инкубации были добавлены NK-клетки (NK-92 клеточная линия, ATCC) и цитотоксические лимфоциты, выделенные из селезенок мышей СЗНА. В обеих культурах наблюдалось увеличение скорости гибели клеток, предварительно со-инкубированных с белком HSP70 (свободным или в составе GEVs), что указывает на активацию противоопухолевого ответа.

Способность нагруженных HSP70 GEVs к активации противоопухолевого иммунного ответа была также оценена на животных моделях. Мышей линии BALB/C прививали опухолевыми клетками СТ26 совместно с нагруженными HSP70 GEVs (группа HSP70+GEVs). Было показано для группы HSP70+GEVs увеличение в 2 раза продолжительности жизни животных, уменьшение размера и массы опухоли в 3 раза, по сравнению с группами контроля. Для оценки вовлеченности в противоопухолевые эффекты иммунной системы к клеткам СТ26 были добавлены цитотоксические лимфоциты, полученные из селезенок экспериментальных мышей спустя 21 день развития опухоли. Было показано значительное снижение пролиферативной активности клеток, со-инкубированных с полученными из селезенок мышей группы HSP70+GEVs цитотоксическими лимфоцитами, что свидетельствует об их активации.

На основе полученных результатов можно сделать вывод, что нагруженные экзогенным HSP70 GEVs способны активировать противоопухолевый иммунный ответ *in vitro* и *in vivo*.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме: "Изучение молекулярных и клеточных компонентов патогенеза социально-значимых заболеваний для разработки методов ранней диагностики и лечения" (регистрационный номер №121060200125-2)

1. Oiseth S. J. Cancer immunotherapy: a brief review of the history, possibilities, and challenges ahead // Journal of Cancer Metastasis and Treatment. 2017.V. 3. No 10. P. 250
2. Guzhova I. et al. HSP70-based anti-cancer immunotherapy// Hum Vassin Immunother. 2016. V.2. No. 12(10):2529-2535

Роль неструктурированных участков дрожжевого белка Sup35 в формировании биоконденсатов при стрессовых воздействиях

Н.А. Горшенева¹, А.Е. Гаврилов¹, А.В. Гризель², К.Ю. Куличихин¹, А.Г. Матвеев³, А.А. Рубель¹,
Ю.О. Чернов²

E-mail: havrilovalex02@gmail.com

¹Научная лаборатория биологии амилоидов СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

²Технологический университет Джорджии, Атланта, США

³Кафедра генетики и биотехнологии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Одним из способов компартиментализации эукариотических клеток является образование немембранных органелл, содержащих белки и/или нуклеиновые кислоты — биомолекулярных конденсатов. Биоконденсаты образуются в результате разделения фаз на границе двух жидкостей (англ. Liquid-liquid phase separation, LLPS) или гелеобразования. В разделении фаз на границе двух жидкостей преимущественно участвуют мультивалентные белки, содержащие домены межбелковых взаимодействий, или белки с неструктурированными участками (не имеющие определенной вторичной и третичной конформации при физиологических условиях) [1]. Белки с неструктурированными участками также могут образовывать и высокомолекулярные белковые агрегаты фибриллярной природы с межмолекулярными кросс-бета структурами (амилоидные агрегаты). Примером такого белка является дрожжевой белок Sup35, который и был выбран нами для изучения.

В клетках дрожжей Sup35 выполняет функцию фактора терминации трансляции (eRF3). Sup35 способен образовывать как амилоидные фибриллы, наследуемые в клеточных поколениях, так и обратимые биомолекулярные конденсаты. Неструктурированный N-домен Sup35 играет ведущую роль в его амилоидной агрегации. Роль NM-доменов Sup35 в разделении фаз на границе двух жидкостей в настоящий момент активно изучается [2]. Целью данного исследования является изучение роли неструктурированных NM-доменов Sup35 в его конденсации, вызванной стрессовыми воздействиями (гиперосмотический шок, снижение цитоплазматического pH).

Для достижения данной цели производные Sup35NM, содержащие различные делеции внутри N-домена, были слиты с желтым флуоресцентным белком (YFP) или же с красным флуоресцентным белком (yTag-RFP-T) и сверхпродуцированы в клетках *S. cerevisiae*. Затем был проведен анализ способности исследуемых белков образовывать жидкие конденсаты *in vivo* при гиперосмотическом шоке и снижении цитоплазматического pH.

В ходе работы было показано, что NM-домены Sup35 конденсируются в ответ на гиперосмотический шок при физиологических значениях pH. Делеции различных участков Sup35N домена нарушают его конденсацию, в частности, наиболее сильное влияние оказывают Q/N богатый участок (1-39 а.к.) и участок олигопептидных повторов (40-97 а.к.). В то же время NM-домены Sup35 не отвечают на предполагаемое снижение цитоплазматического pH, индуцируемое инкубацией клеток дрожжей в буфере pH5 с добавлением 2,4-динитрофенола.

Исследование было выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант №20-14-00148-П), а также Санкт-Петербургского Государственного - Университета (проект № 94031363)

1. Banani, S. F., Lee, H. O., Hyman, A. A., & Rosen, M. K. (2017). Biomolecular condensates: organizers of cellular biochemistry. *Nature reviews. Molecular cell biology*, 18(5), 285–298.
2. Franzmann, Titus M et al. “Phase separation of a yeast prion protein promotes cellular fitness.” *Science (New York, N.Y.)* vol. 359,6371 (2018): eaao5654

Масштабирование биоцементации почв микроорганизмами до полевых испытаний

Д.А. Головкина^{1,2}, Е.В. Журишкина^{1,2}, А.А. Кульминская^{1,2}

E-mail: golovkina_da@pnpi.nrcki.ru

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

²Курчатовский геномный центр — ПИЯФ, Гатчина, Россия

Недостаточно стабильные механические свойства почвы в разных регионах могут стать причиной серьезных проблем в строительстве зданий и дорог, приводящих к эрозиям почвы и разрушениям склонов. В настоящее время в сфере строительства используется химическая цементация, но такой подход может негативно сказаться на экологии окружающей среды. В качестве альтернативного решения возрос интерес к биологической цементации за счет микроорганизмов [1]. В результате улучшаются геотехнические свойства грунта за счет связывания почвенных частиц образующимися минералами. Несмотря на большое количество лабораторных исследований, масштабирование технологии еще мало изучено. Очень мало работ посвящены полевым испытаниям технологии биоцементации.

Целью данной работы было провести масштабирование лабораторных экспериментов уплотнения почвы.

В ходе работы было отобрано пять штаммов, обладающих высокими параметрами уреазной активности и образования карбоната кальция [2]. Из этих штаммов была составлена бактериальная смесь и проверена на ее способность уплотнять средние объемы почвы в контролируемых условиях температуры и влажности, соответствующие летним параметрам Ленинградской области. Образец, обработанный цементирующим раствором и микроорганизмами, показал уплотнение почвы в размере 12 см и повышение прочностных характеристик по сравнению с контролем, обработанным водой. Следующим этапом работы было проведение полевых испытаний уплотнения почвы с помощью данной бактериальной смеси. Участок, обработанный бактериальной смесью и цементирующим раствором, показал увеличение механических свойств почвы в два раза по сравнению с контролем, обработанным водой.

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

1. DeJong J., Mortensen B. M., Martinez B. and Nelson D. Bio-mediated soil improvement. // Ecological Engineering. 2010. V.36. P.197–210.
2. Golovkina D.A., Zhurishkina E.V., Ivanova L.A., Kulminskaya A.A., et al. Calcifying Bacteria Flexibility in Induction of CaCO₃ Mineralization. // Life. 2020. V.10. P. 317.

Терморубин – ингибитор элонгации трансляции прокариот**А.А. Грачев^{1,2}, О.А. Толочева¹, Е.В. Полесскова^{1,2}, А.Л. Конева^{1,2,3}**

E-mail: grachev_aa@pnpi.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Трансляция, проходящая на рибосомах с вовлечением широкого спектра белков и различных молекул РНК, является сложным многостадийным процессом. Поскольку система биосинтеза белка обеспечивает нормальную жизнедеятельность организма, сбой в ее работе может оказаться фатальным для клеток, в том числе и бактериальных. Механизм действия половины соединений, проявляющих бактерицидный или бактериостатический эффект, направлен на ингибирование одного или нескольких этапов синтеза полипептидов [1]. Широкое, зачастую бесконтрольное, применение антибактериальных препаратов, в том числе в качестве превентивной меры, стимулирует развитие и распространение резистентных и суперрезистентных штаммов бактерий. В связи с этим поиск новых природных и синтетических антибиотиков, а также изучение механизмов их действия являются одной из наиболее актуальных задач науки о жизни.

Терморубин – низкомолекулярный ингибитор биосинтеза белка прокариот, впервые выделенный в качестве вторичного метаболита *Thermoactinomyces* более 50 лет назад [2]. Механизм действия данного антибиотика до конца не изучен, известно, что он нарушает биосинтез белка и грамположительных, и грамотрицательных бактерий. В данной работе показано влияние антибиотика на кинетику реакций цикла элонгации в реконструированной *in vitro* системе трансляции *E. coli*. Был показан эффект на стабильность связывания пептидил-тРНК с А сайтом элонгирующей рибосомы [3]. Методом криоэлектронной микроскопии показаны изменения в структурной организации 23S рРНК, приводящие к потере водородной связи с 37 нуклеотидом тРНК. Данное положение молекул тРНК является гипервариабельным в отношении модификаций азотистых оснований и играет важную роль в кинетике и стабильности взаимодействия тРНК с А сайтом [4]. В работе показана разница в скорости А-сайтового связывания тРНК с различными антикодонами и нуклеотидами в 37 положении в присутствии терморубина, что может говорить о кодон-специфичном действии данного антибиотика на бактериальную систему трансляции.

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. Craveri R. et al. Thermorubin, a New Antibiotic from a Thermoactinomycete //Clin. Med. Winnetka, Ill. – 1964. – Т. 71. – №. 3. – С. 511-21.
3. Paranjpe M. N. et al. Insights into the molecular mechanism of translation inhibition by the ribosome-targeting antibiotic thermorubin //Nucleic acids research. – 2023. – Т. 51. – №. 1. – С. 449-462.
4. Konevega A. L. et al. Purine bases at position 37 of tRNA stabilize codon–anticodon interaction in the ribosomal A site by stacking and Mg²⁺-dependent interactions //Rna. – 2004. – Т. 10. – №. 1. – С. 90-101.

Ассоциация уровня экспрессии гена *HRH1* с эффективностью и безопасностью терапии антипсихотическими препаратами пациентов с расстройствами шизофренического спектра

*М.Н. Грунина*¹, *А.М. Заботина*^{1,2}, *Е.Е. Ершов*⁴, *Е.М. Крупицкий*³, *А.Е. Тараскина*^{1,2,3}

E-mail: by2306@mail.ru

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

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

³ *Национальный медицинский исследовательский центр психиатрии и неврологии имени В.М. Бехтерева, Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Санкт-Петербургская городская психиатрическая больница №1 имени П.П. Кащенко, с. Никольское, Гатчинский район, Россия*

Гистаминергическая система играет важную роль в патогенезе расстройств шизофренического спектра (РШС) [1], уровень гистаминовых рецепторов H1R ассоциируют с развитием негативных симптомов шизофрении [2] и метаболического синдрома при приеме антипсихотических препаратов (АП) [3]. Поскольку гистаминовые рецепторы обнаружены на моноклеарах периферической крови (МКПК) [4], становится возможным персонализированный подход к прогнозу эффективности и безопасности терапии пациента еще до начала лечения.

Цель исследования состояла в оценке уровня мРНК гена *HRH1* в МКПК пациентов с РШС и определении его влияния на эффективность и безопасность проводимой терапии антипсихотическими препаратами (АП).

В исследование включено 112 пациентов с первым психотическим эпизодом, проходящие монотерапию галоперидолом (n=56) или оланзапином (n=56). Уровень мРНК гена *HRH1* оценивали в МКПК, выделенных из крови, взятой до начала и через 28 дней лечения, а также в МКПК, культивируемых 72 часа в присутствии галоперидола или оланзапина. Уровень экспрессии определяли методом ПЦР в реальном времени с использованием флуорогенного зонда TaqMan. Эффективность лечения оценивали психометрическим обследованием (шкала PANSS). Безопасность определяли по возникновению побочных реакций: антипсихотик-индуцированного набора веса $\geq 7\%$ от начальной массы тела (AIWG) и экстрапирамидных симптомов (шкала Симпсона-Ангуса).

Уровень мРНК гена *HRH1* не ассоциирован с эффективностью терапии АП, ни до начала лечения, ни на 28 день приема АП. Увеличение экспрессии гена *HRH1* выявлено при культивировании с оланзапином в группе пациентов с низким ответом на терапию (p=0,035). Достоверных ассоциаций изучаемого параметра с увеличением массы тела и возникновением экстрапирамидных симптомов при лечении АП не обнаружено. Таким образом уровень мРНК гена *HRH1* в МКПК при культивировании *in vitro* может служить маркером низкой эффективности терапии оланзапином.

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

1. Hu W.W., Chen Z. The roles of histamine and its receptor ligands in central nervous system disorders: An update. *Pharmacol Ther.* 2017. V. 175. P. 116–132.
2. Wu S., Gao C., Han F. et al. Histamine H1 Receptor in Basal Forebrain Cholinergic Circuit: A Novel Target for the Negative Symptoms of Schizophrenia?. *Neurosci. Bull.* 2022. V. 38. P. 558–560.
3. Vehof J., Risselada A.J., Al Hadithy A.F. et al. Association of genetic variants of the histamine H1 and muscarinic M3 receptors with BMI and HbA1c values in patients on antipsychotic medication. *Psychopharmacology (Berl).* 2011. V. 216. No. 2. P. 257-265.
4. Wong T.S., Li G., Li S. et al. G protein-coupled receptors in neurodegenerative diseases and psychiatric disorders. *Signal Transduct Target Ther.* 2023. V. 8. No. 1. P. 177.

Подбор оптимальной концентрации ДМСО для криоконсервации гемопоэтических стволовых клеток

А.Г. Иванова¹, Р.Г. Батулин¹, Я.О. Музалевский², А.Р. Волкова³, Э.Р. Котлякова³, Э.А. Елагина⁴
E-mail: 19ivanova91@gmail.com

¹ФГАОУВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Институт физики, Казань, Россия

²ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр детской гематологии, онкологии и иммунологии имени Дмитрия Рогачева» Минздрава России, Москва, Россия

³ГАУЗ «Детская республиканская клиническая больница» Минздрава Республики Татарстан, Казань, Россия

⁴ФГАОУВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия

Способность стволовых клеток дифференцироваться в различные типы специализированных клеток обеспечивает большой потенциал их применения в клинической практике [1]. Однако, трансплантация гемопоэтических стволовых клеток (ГСК), выделенных из пуповинной крови, может потребоваться через несколько лет. Криоконсервация позволяет сохранять жизнеспособность гемопоэтических стволовых клеток на протяжении десятков лет. По этой причине критически важно, чтобы ГСК сохраняли свою жизнеспособность и функциональность во время процедур замораживания, хранения и оттаивания [2].

Оптимальная процедура криоконсервации зависит от целого ряда параметров: условия транспортировки, выбора криопротектора и его концентрации, протокола замораживания, условия хранения и процедуры подготовки клеток к трансплантации [3].

Одним из распространенных криопротекторов, используемых при криоконсервации различных типов стволовых клеток, включая ГСК, является диметилсульфоксид (ДМСО). Однако исследования показывают, что ДМСО является токсичным, как непосредственно для клеток, так и для пациента, и может вызывать побочные эффекты при введении концентрата со стволовыми клетками, что также может повлиять на восстановление пациента после процедуры [4]. В нашей работе представлены результаты исследования зависимости влияния концентрации криопротектора ДМСО на жизнеспособность ГСК при криоконсервации и длительном хранении с целью их применения в клинической терапии в ГАУЗ «ДРКБ» г. Казани.

Проведенные ранее исследования показали, что жизнеспособность клеток при добавлении ДМСО зависит от добавления других добавок (например, Волювена, трегалоза), от концентрации стволовых клеток, протокола замораживания и условий хранения [5].

В нашей работе мы показали, как меняется жизнеспособность ГСК, выделенных из пуповинной крови в зависимости от конечного процента ДМСО (5; 7.5; 10 %) в объеме образца 25 мл. Установлено, что при 5% концентрации ДМСО жизнеспособность стволовых клеток была ниже 90%. При концентрации ДМСО 7.5 и 10% среднее количество жизнеспособных клеток составляло 96% и 98%, соответственно. Результаты проделанной работы внесены в протокол криоконсервации ГСК Биобанка КФУ, используемая конечная концентрация ДМСО находится в диапазоне 7-8%, т.к. при 10% концентрации ДМСО жизнеспособность клеток в пределах статистической погрешности такая же как при концентрации 7.5%, но содержит больший объем токсичного ДМСО.

1. Gratwohl A., Baldomero H., Gratwohl M. et al. // Haematologica. 2013. V. 98, №. 8. P. 1282.
2. Kubiak A., Matuszak P., Bembnista E., Kozłowska-Skrzypczak M. // Transplantation proceedings. 2016. V. 48, №. 5. P. 1806-1809.
3. Hunt C. J. // Transfusion Medicine and Hemotherapy. 2011. V. 38, №. 2. P. 107-123.
4. Shu Z., Heimfeld S., Gao D. // Bone marrow transplantation. 2014. V. 49, №. 4. P. 469-476.
5. Rowley S.D., Feng Z., Chen L. et al. // Bone marrow transplantation. 2003. V. 31, №. 11. P. 1043-1051.

Роль гена *swiss cheese* в поддержании репродуктивной системы самцов *Drosophila melanogaster*

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

E-mail: ivanova_ea@rpi.nrcki.ru

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

Фосфатидилхолин является одним из наиболее распространённых фосфолипидов в клетке, который расщепляется различными видами фосфолипаз до лизофосфатидилхолина или глицерофосфохолина. Одним из таких ферментов является пататин-подобная фосфолипаза б, кодируемая геном *PNPLAб*, который является эволюционно-консервативным. Его ортолог у плодовой мушки *Drosophila melanogaster* – ген *swiss cheese* (*sws*). Потеря его функции у дрозофилы приводит к образованию многочисленных полостей и глиальных аберрантных структур вокруг аксонов в мозге, что вызывает преждевременную гибель особей [1, 2]. Было показано [3], что помимо нервной системы ген *sws* экспрессируется и в репродуктивной системе самцов: в переднем семявыносящем протоке, вторичных клетках придаточных желез и в клетках зрелых цист семенников.

Репродуктивная система *Drosophila melanogaster* является удобной системой для изучения процессов поддержания и развития зародышевых клеток (сперматогенез), а также соматических клеток цисты, дающих начало тканям, окружающим и поддерживающим образование гамет. Такая защитная изоляция зародышевых клеток обеспечивается физическим барьером, образованным между соматическими клетками (гематотестикулярным барьером). Его структуру и функциональность обеспечивают различные гены, нарушение работы которых может приводить к образованию нефункциональных гамет, что выражается в снижении плодовитости мух. Предполагается, что ген *sws* может входить в число генов, необходимых для нормального функционирования репродуктивной системы самцов.

Данная работа была направлена на анализ состояния репродуктивной системы самцов, мутантных по гену *sws* (*sws¹*), в качестве контроля использовались особи дикого типа (*CantonS*). Были проанализированы такие параметры: размер семенного пузырька, придаточных желез и семявыносящего протока, гематотестикулярный барьер в семенниках, процесс индивидуализации сперматид. В ходе работы было показано, что эффекты мутации *sws¹* вызывают нарушения целостности гематотестикулярного барьера в цистах ранних и поздних сперматид, но к тому же затрагивают один из важнейших процессов сперматогенеза – индивидуализацию сперматид, что в итоге приводит к образованию небольшого количества функциональных сперматозоидов.

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.

Криоэлектронная микроскопия экстраклеточных везикул плазмы крови при болезни Паркинсона, ассоциированной с мутациями в гене *GBA1*

А.Д. Изюмченко^{1,2}, А.Э. Копытова^{1,2}, Д.Г. Кулабухова^{1,2}, Л.А. Гараева¹, И.В. Милюхина³,
Е.Б. Пичкур^{1,4}, С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.А. Штам^{1,4}

E-mail: artemiz98@yandex.ru

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

² ПСПБГМУ им И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

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

⁴ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Экстраклеточные везикулы (ЭВ) – это частицы с внешним липидным бислоем, секретлируемые клетками организма, осуществляющие межклеточную коммуникацию и играющие важную роль в различных физиологических и патологических процессах. ЭВ могут быть вовлечены в патогенез болезни Паркинсона (БП), участвуя в переносе патогенных форм альфа-синуклеина [1]. Мутации в гене *GBA1* являются фактором высокого риска развития БП [2]. Однако не у всех носителей мутации в гене *GBA1* развивается БП в течение жизни.

Целью данной работы является сравнительный анализ морфологии ЭВ плазмы крови пациентов с *GBA*-ассоциированной БП (*GBA*-БП), бессимптомных носителей мутаций в гене *GBA1* (*GBA*-носители) и лиц контрольной группы.

ЭВ были получены ультрацентрифугированием 10 мл пулированной плазмы крови *GBA*-носителей (N=6, носители мутации N370S (N=3) и L444P (N=3)), пациентов с *GBA*-БП (N=14, носителей мутации N370S (N=7) и L444P (N=7)) и контроля (N=12) с использованием центрифуги Optima L-90K. Концентрация частиц определялась методом анализа траектории наночастиц на анализаторе NTA NanoSight® LM10. ЭВ были визуализированы с помощью криоэлектронного микроскопа Titan Krios 60-300 TEM/STEM. Подсчет частиц был произведен в программе ImageJ 1.53k.

Среди ЭВ преобладали одиночные везикулы сферической формы (75,0% для *GBA*-носителей, 56,4% для *GBA*-БП и 66,7% для контроля). ЭВ пациентов с *GBA*-БП отличаются по своей морфологии от контроля и *GBA*-носителей, характеризуясь усложнением структуры ЭВ. По размеру ЭВ пациентов с *GBA*-БП (121,2 (50-491,3) нм) были больше диаметром по сравнению с контролем (112,3 (35-264,6) нм) и *GBA*-носителями (95,8 (32,3-490,3) нм) ($p=0,038$, $p<0,0001$, соответственно). Выявлена зависимость размера ЭВ от тяжести мутаций в гене *GBA1*: диаметр ЭВ пациентов с *GBA*-БП с мутацией L444P (118,8 (55,2-445,7) нм) статистически значимо меньше, по сравнению с группой пациентов с *GBA*-БП с мутацией N370S (132,2 (50-491,3) нм) ($p<0,0001$), а диаметр ЭВ *GBA*-носителей мутации L444P (119,4 (41,9-490,3) нм) статистически значимо больше, по сравнению с *GBA*-носителями мутации N370S (80,6 (32,3-406,1) нм) ($p<0,0001$).

Впервые проведен сравнительный анализ морфологии везикул плазмы крови пациентов с *GBA*-БП и бессимптомных носителей мутаций в гене *GBA1* методом криоэлектронной микроскопии. Для ЭВ плазмы крови пациентов с *GBA*-БП характерны увеличенный размер частиц и более высокая представленность сложных форм в сравнении с везикулами как *GBA*-носителей, так и лиц контрольной группы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-74-20146-н

1. Pinnell J. R., Cui M., Tieu K. Exosomes in Parkinson disease // Journal of neurochemistry. – 2021. – Т. 157. – №. 3. – Р. 413-428.
2. Do, J. McKinney, C. Sharma, P. Sidransky, E. Glucocerebrosidase and its relevance to Parkinson disease // Mol. Neurodegener. – 2019 –Т. 14.- Р 36.

Методики для направленного редактирования генома антибиотикорезистентных штаммов бактерий *Staphylococcus aureus* и *Klebsiella pneumoniae*

Д.А. Кандина¹, Ю.В. Сопова^{1,2}, М.Е. Велижанина¹, В.В. Гостев^{3,4}, С.В. Сидоренко³

E-mail: candyda20@mail.ru, y.sopova@spbu.ru

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

² Санкт-Петербургский филиал Института общей генетики им. Н.И. Вавилова, Санкт-Петербург, Россия

³ Детский научно-клинический центр инфекционных болезней Федерального медико-биологического агентства, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Северо-Западный государственный медицинский университет им. И.И. Мечникова, Санкт-Петербург, Россия

Направленное генетическое изменение генома бактерий имеет решающее значение для понимания функции конкретных генов при изучении проблемы антибиотикорезистентности. *Staphylococcus aureus* и *Klebsiella pneumoniae* являются распространенными возбудителями нозокомиальных инфекций в России.

Staphylococcus aureus, как представитель грамположительных бактерий, трудно поддается генетическому манипулированию, но одним из успешно работающих вариантов для редактирования является система, основанная на гомологичной рекомбинации, совмещенной с Cas9-опосредованной контрселекцией [1].

Мы провели генетическое редактирование геномной ДНК штамма RN4220 *S. aureus* [2] с помощью двухкомпонентной системы, состоящей из вектора с геном рекомбиназы и вектора с геном нуклеазы Cas9 совместно с направляющей РНК для контрселекции клеток, в которых отсутствует вводимая нами мутация. Мы показали, что данный метод подходит для получения направленных делеций (получены делеции в генах *gdpP*, *pbp4*, *yfhP*), а также позволит проводить эффективную генную инженерию *S. aureus*, направленную на выявление функций конкретных генов, отвечающих за появление резистентности к антибиотикам [2, 3].

Совместное возникновение гипервирулентности и лекарственной устойчивости представляет большую проблему для клинического лечения, а гипервирулентная *Klebsiella pneumoniae* с множественной лекарственной устойчивостью за последние годы показывает тенденцию широкого распространения и представляет угрозу для здоровья человека.

Для направленного редактирования генома грамотрицательной бактерии *Klebsiella pneumoniae* мы планируем использовать методику, также использующую нуклеазу Cas9 в сочетании с трёхкомпонентной рекомбинационной системой бактериофага лямбда (Gam-Eco-Beta) [4]. В качестве мишени мы планируем использовать ген аэробактина *iucA*.

Аэробактин продуцируется в гипервирулентных *K. pneumoniae* и индуцирует устойчивость бактерий к ципрофлоксацину путем снижения уровня окислительного стресса. Мы планируем получить делецию плазмидно-локализованного гена *iucA*, чтобы охарактеризовать функциональную роль аэробактина *IucA* при развитии гипервирулентности.

Исследование выполнено при поддержке гранта СПбГУ PURE ID 94030690

1. Penewit K., Holmes E.A., McLean K., Ren M., Waalkes A., Salipante S.J. Efficient and scalable precision genome editing in *Staphylococcus aureus* through conditional recombineering and CRISPR/Cas9-mediated counterselection // mBio. 2018 Feb. 20. 9(1).
2. Сопова Ю.В., Велижанина М.Е., Кандина Д.А., Гостев В.В., Чулкова П.С., Сулян О.С., Сидоренко С.В. Влияние делеции в некаталитическом домене *gdpP* на фенотип *Staphylococcus aureus* посредством направленного геномного редактирования с помощью системы CRISPR/Cas9 // Генетика. 2023. Т. 59. № 9. С. 1094-1098.
3. Gostev V., Kalinogorskaya O., Sopova J., Sulian O., Chulkova P., Velizhanina M., Tsvetkova I., Ageevets I., Ageevets V., Sidorenko S. Adaptive Laboratory Evolution of *Staphylococcus aureus* Resistance to Vancomycin and Daptomycin // Mutation Patterns and Cross-Resistance. Antibiotics. 2023. Vol. 12. P. 928.
4. McConville T.H., Giddins M.J., Uhlemann A.C. An efficient and versatile CRISPR-Cas9 system for genetic manipulation of multi-drug resistant *Klebsiella pneumoniae* // STAR Protoc. 2021 Mar. 6. 2(1).

Alterations in Cortical Glutamatergic Gene Expression and Gut Microbiota Composition Associated with Pro-cognitive Effects of Medium-Chain Triglyceride Supplementation

E.A. Kim^{1,2}, E.A. Shirokov^{1,3}, V.A. Nikitina¹, A.P. Schwarz⁴, D.U. Krytskaya¹, N.A. Arseniev², I.N. Abdurasulova¹, V.M. Klimenko¹, K.P. Shcherbakova¹, A.N. Trofimov¹

E-mail: elizaveta.kim@spcpcu.ru

¹Institute of Experimental Medicine

²St. Petersburg State Chemical Pharmaceutical University

³Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

⁴Sechenov Institute of Evolutionary Physiology and Biochemistry, St. Petersburg, Russia

The neuroprotective effects of ketosis, induced by a ketogenic diet (KD), are well established. However, prolonged adherence to KD can lead to side effects. The consumption of medium-chain triglycerides (MCTs) offers a potential way to achieve a state of moderate ketosis on a normal diet, correcting cognitive impairments [1,2]. Both KD and MCT consumption lead to changes in gut microbiota [3], which may affect brain activity [4]. This study aimed to investigate the effects of moderate ketosis, induced by MCTs, on memory indices, gut microbiota composition, and expression of glutamatergic-related genes in the brain cortex.

Adult male Wistar rats on a standard diet were tested in behavioral tests (Y-maze, open field), after which part of the rats had their food removed for 6 hours a day and were orally administered MCTs (2 ml/kg/day) for two weeks, and then repeated the tests, adding Morris Water Maze. After the final MCT administration, the animals were euthanized, blood was collected for biochemical analysis, and the brain was collected for qPCR. The microbiota composition was studied using genomic DNA sequencing isolated from animal feces. Statistical analysis of the results: rm-ANOVA, Student's t-test, and Mann-Whitney U-test, $p < 0.05$.

MCT administration increased ketone body concentration in the blood, improved working memory, suppressed locomotor activity, and improved spatial memory compared to the control group. The expression of genes encoding glutamatergic NMDA and AMPA receptor subunits (*GluN2a*, *GluN2b*, *GluA1*, *GluA2*) was increased in the brain cortex of the MCT group, indicating more active memory consolidation. The MCT group had increased levels of *Bacteroidota* and decreased levels of *Patescibacteria* in their gut microbiota composition. The results suggest that MCTs could be a promising approach for further research into the protective effects of a ketogenic diet in cognitive impairment models in laboratory rats.

Research support: Russian Science Foundation, project No. 19-75-10076

1. Shcherbakova K., Schwarz A., Apyatin S., Karpenko M., Trofimov A. Supplementation of Regular Diet With Medium-Chain Triglycerides for Procognitive Effects: A Narrative Review // *Front. Nutr.*– 2022.– T. 9.– C. 934497.
2. Wang D., Mitchell E.S. Cognition and Synaptic-Plasticity Related Changes in Aged Rats Supplemented with 8- and 10-Carbon Medium Chain Triglycerides // *PLoS One.*– 2016.– T. 11, № 8.– C. e0160159.
3. Roopashree P.G., Shetty S.S., Suchetha Kumari N. Effect of medium chain fatty acid in human health and disease // *J. Funct. Foods.*– 2021.– T. 87.– C. 104724.
4. Tang Y., Wang Q., Liu J. Microbiota-gut-brain axis: A novel potential target of ketogenic diet for epilepsy // *Curr. Opin. Pharmacol.*– 2021.– T. 61.– C. 36–41.

Структурные изменения головного мозга пациентов с диагнозом шизофрения в ходе ТМС-терапии

Д.А. Ковалишина, С.И. Карташов

E-mail: kovalishina_da@nrcki.ru

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Лечение при помощи транскраниальной магнитной стимуляции (ТМС) является эффективным методом купирования негативных симптомов у больных шизофренией [1]. Объективным нейрофизиологическим критерием высокой эффективности лечения пациента могут служить данные магнитно-резонансной томографии. Изучение структурной целостности вещества мозга пациентов может быть проведено с использованием различных методик сканирования. Для целей, намеченных в данной работе, была избрана диффузионная МРТ.

При помощи трактографии, которая основана на диффузионной МРТ, можно оценить направление роста волокон белого вещества. Эти данные способствуют построению матриц структурных связей отделов мозга друг с другом. Данные матрицы связанности были получены для больных шизофренией до, сразу после и спустя 6 месяцев после проведения последнего сеанса ТМС-терапии. Матрицы были рассчитаны и обработаны с помощью программных продуктов MRtrix3 которые имеют открытый исходный код [2]. Процедура сканирования была проведена на 3-х Тесловом магнитно-резонансном томографе Magnetom Verio производства компании Siemens (Сименс, Германия).

Матрицы связанности показывают структурные связи отделов мозга, изменения которых вызваны морфологическими изменениями при ТМС-терапии. Для сопоставления результатов лечения и эффективности терапии, было проведено сравнение с данными группы здоровых добровольцев. В дальнейшем теория графов будет применена для более глубокого изучения различия матриц структурной связанности между здоровыми добровольцами и пациентами на разных этапах лечения [3].

3. Lorentzen, R., Nguyen, T.D., McGirr, A. et al. The efficacy of transcranial magnetic stimulation (TMS) for negative symptoms in schizophrenia: a systematic review and meta-analysis. *Schizophr* 8, 35 (2022).
4. J.-D. Tournier, R. E. Smith, D. Raffelt, R. Tabbara, T. Dhollander, M. Pietsch, D. Christiaens, B. Jeurissen, C.-H. Yeh, and A. Connelly. MRtrix3: A fast, flexible and open software framework for medical image processing and visualisation. *NeuroImage*, 202 (2019), pp. 116–37.
5. Yeh, C.-H., Jones, D.K., Liang, X., Descoteaux, M. and Connelly, A. (2021), Mapping Structural Connectivity Using Diffusion MRI: Challenges and Opportunities. *J Magn Reson Imaging*, 53: 1666-1682.

Изучение влияния фактора CHD1 на процесс дозовой компенсации у самцов *Drosophila melanogaster*

Я.А. Кучинская¹, А.Ю. Конев¹

E-mail: kuchinskaya_yaa@pnpi.nrcki.ru

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

Процесс дозовой компенсации (ДК) у дрозофилы может выступать в качестве модели для изучения координированных изменений транскрипции на уровне отдельных хромосом и вовлеченных в этот процесс факторов, благодаря работе которых происходит двукратное увеличение экспрессии X-хромосомных генов у самцов. Комплекс дозовой компенсации (КДК) (MSL: male-specific lethal) играет центральную роль в этом процессе. В состав комплекса входят белки MSL1-MSL3, ацетилтрансфераза MOF, РНК геликаза MLE и две длинные некодирующие РНК (roX1 и roX2) [1]. Наша работа направлена на выявление возможной функции консервативного хроматин-ремоделирующего фактора CHD1 (chromodomain-helicase-DNA-binding protein 1) в процессе ДК у *D. melanogaster*, точнее влияние этого фактора на изменение уровней экспрессии некодирующих РНК roX1 и roX2. 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].

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 $\log_2\text{FoldChange}$ для дифференциальной экспрессии генов X-хромосом и аутосом групп сравнения показали для мутантных по гену *Chd1* самцов небольшой, но достоверный сдвиг в распределении плотности $\log_2\text{FoldChange}$ в сторону увеличения экспрессии для X-хромосомных генов по сравнению с аутосомными (для самок различий не обнаружено). Нами получены данные о специфическом вовлечении *Chd1* в регуляцию экспрессии днРНК roX1 и roX2 в ходе развития самцов дрозофилы. В наибольшей степени различия в уровне экспрессии между диким типом и нуль-мутантом демонстрируют образцы из голов 4-х и 10-дневных имаго. Цитологические данные, полученные путём иммуноокрашивания препаратов политенных хромосом, кроме изменения структуры X-хромосомы самцов мутантов по *Chd1*, так же показывают различия в распределении белка CHD1 у дикого типа и мутанта, тогда как у самок картина связывания данного белка не меняется.

Кроме нуль-мутантов по гену *Chd1* и особей дикого типа мы рассматривали также и мутантов со сверхэкспрессией белка CHD1. Так у самцов на фоне сверхэкспрессии в слюнных железах трансгенов, кодирующих как нативную (P{UAST-*Chd1*(wt)) так и каталитически не активную (P{UAST-*Chd1*(KR)559) формы белка CHD1, нарушался нормальный паттерн связывания комплекса MSL с X-хромосомой – появлялись не характерные для этого комплекса аутосомные сайты связывания. Как в случае сверхэкспрессии вышеупомянутых трансгенов в слюнных железах, так и у личинок с всеобщей сверхэкспрессией обеих форм белка CHD1 под Gal4 драйвером наблюдаются изменения в экспрессии днРНК roX1 и roX2 у обоих полов, что вместе с данными об изменении локализации MSL комплекса может свидетельствовать о влиянии высоких уровней экспрессии CHD1 на процесс ДК. В целом полученные результаты свидетельствуют о вовлечении CHD1 в регуляцию структуры хроматина и экспрессии генов связанных с ДК у дрозофилы.

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 – V35 – N. 3, – P. 174–175.

Создание модели для изучения патогенеза при синдроме Брука

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

E-mail: latypova_em@pnpi.nrcki.ru

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

Синдром Брука (СБ) – редкое врожденное аутосомно-рецессивное заболевание, характеризующиеся повышенной ломкостью костей, прогрессирующими контрактурами суставов, сколиозом, обусловленным деформацией тел позвонков и низкорослостью [1]. В настоящее время лечение пациентов с СБ включает физиотерапию, ортезирование, остеотомию, применение бисфосфонатов и препаратов, содержащих витамин D и кальций [2]. Несмотря на то, что впервые данный синдром был описан в 1878 году, заболевание остается малоизученным. Генетические исследования, направленные на изучение молекулярных механизмов данного заболевания, выявили мутации в генах *FKBP10* и *PLOD2*, связанные с развитием СБ.

Ген *PLOD2* расположен на третьей хромосоме в положении q23-24 и кодирует лизилгидроксилазу-2 (LH2, КФ 1.14.11.4), которая участвует в гидроксировании лизиновых остатков в коллагеновых волокнах. В результате альтернативного сплайсинга *PLOD2* образуется две формы белка: LH2a и LH2b [3]. Считается, что более длинная форма LH2b, содержащая 758 аминокислот, экспрессируется повсеместно. Более короткая форма LH2a (737 аминокислот), лишенная дополнительного экзона 13A, была обнаружена в почках, селезенке, печени, хрящах и плаценте и отсутствовала в коже, легких, аорте и твердой мозговой оболочке [4]. В настоящее время мутации, связанные с развитием СБ, описаны как для LH2a, так и LH2b [5].

В ходе данной работы были получены генетические конструкции для экспрессии двух мутантных аллелей гена *PLOD2*. В качестве контроля была получена генетическая конструкция для экспрессии гена *PLOD2* дикого типа. Для определения локализации продукта гена *PLOD2* были получены генетические конструкции для экспрессии мутантных и нативного вариантов *PLOD2* белка слитых с геном зеленого флуоресцентного белка GFP. Полученные генетические конструкции позволят в дальнейшем получить модели данного заболевания, что поможет глубже понять его этиологию и патогенез.

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

1. Mumm, S., et al., Bruck syndrome 2 variant lacking congenital contractures and involving a novel compound heterozygous *PLOD2* mutation. *Bone*, 2020. 130: p. 115047.
2. Santana, A., et al., Orthopedic Manifestations of Bruck Syndrome: A Case Series with Intermediate to Long-term Follow-Up. *Case Rep Orthop*, 2019. 2019: p. 8014038.
3. Qi, Y. and R. Xu, Roles of PLODs in Collagen Synthesis and Cancer Progression. *Front Cell Dev Biol*, 2018. 6: p. 66.
4. Nyry, M., J. Lantto, and J. Myllyharju, Missense mutations that cause Bruck syndrome affect enzymatic activity, folding, and oligomerization of lysyl hydroxylase 2. *J Biol Chem*, 2009. 284(45): p. 30917-24.
5. Puig-Hervás, M.T., et al., Mutations in *PLOD2* cause autosomal-recessive connective tissue disorders within the Bruck syndrome--osteogenesis imperfecta phenotypic spectrum. *Hum Mutat*, 2012. 33(10): p. 1444-9.

Влияние rs3756063 (C/G), rs11931074 (G/T) гена SNCA на уровень мРНК его сплайсинг вариантов при синуклеинопатиях в лимфоцитах периферической крови

***А.О. Лавринова¹, А.С. Журавлев¹, Е.А. Белых¹, В.Н. Пидюрчина¹, И.В. Милюхина^{1,2,3},
О.А. Беркович², С.Н. Пчелина^{1,2}, А.К. Емельянов^{1,2}***

E-mail: lavrinova.anna@gmail.com

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

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

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

Группа нейродегенеративных заболеваний (мультисистемная атрофия (МСА), деменция с тельцами Леви (ДТЛ), болезнь Паркинсона (БП), болезнь Паркинсона с деменцией (БПД)) характеризуется патологическим накоплением агрегатов альфа-синуклеина (SNCA) в селективных популяциях нейронов и клеток глии. Показано, что изоформы белка альфа-синуклеина (SNCA140, SNCA126, SNCA112, SNCA98) обладают различной способностью к агрегации [1]. Предполагается, что однонуклеотидные полиморфные варианты (ОНП) гена SNCA могут влиять на уровень экспрессии гена SNCA включая его сплайсинг изоформу SNCA112 у пациентов с БП [2, 3].

Цель исследования: оценка влияния ОНП rs3756063, rs11931074 гена SNCA на уровень мРНК его сплайсинг вариантов (SNCA140, SNCA126, SNCA112) в лимфоцитах периферической крови пациентов с синуклеинопатиями (МСА, ДТЛ, БПД, БП).

Исследование включало 636 пациента с синуклеинопатиями (80 МСА, 39 ДТЛ, 43 БПД и 474 БП), и 383 индивидуума контрольной группы. С использованием ПЦР в режиме реального времени и интеркалирующего красителя SYBR Green 1 (Bio-Rad, США) был оценен уровень мРНК SNCA140, SNCA126, SNCA112 в лимфоцитах периферической крови указанных групп. Идентификацию ОНП проводили методом ПЦР с последующим рестрикционным анализом.

Была показана ассоциация ОНП rs11931074 с риском развития МСА (OR=0,48 [95% CI: 0,27-0,86], p=0,013), ДТЛ (OR=0,47 [95% CI: 0,00322-1,00], p=0,049) и подтверждена описанная нами ранее [4] ассоциация rs11931074 с риском развития БП (OR =0,48 [95% CI: 0,34-0,70], p=0,0001). Так же показана ассоциация ОНП rs3756063 с риском развития БПД (OR=0,50 [95% CI: 0,32-0,80], p=0,003). Выявлено снижение уровня мРНК SNCA140 у носителей генотипа GG rs3756063 при сравнении групп пациентов как с МСА, так и БП (p=0,028 и p=0,02, соответственно) с группой контроля. Так же было показано снижение уровня мРНК SNCA140 у носителей генотипа GG rs11931074 при сравнении группы пациентов с БП и группы контроля (p=0,016).

Таким образом, полученные данные свидетельствуют об ассоциации rs11931074 гена SNCA с риском развития МСА и ДТЛ, а также об ассоциации rs3756063 гена SNCA с риском развития БПД среди жителей Северо-Западного региона России, а также влиянии генотипа GG ОНП rs3756063 и rs11931074 на уровень мРНК SNCA140 у пациентов с синуклеинопатиями.

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

1. Murray I.V. et al. Role of alpha-synuclein carboxy-terminus on fibril formation in vitro. *Biochemistry*. 2003 Jul 22;42(28):8530-40.
2. Schmitt I. et al. L-dopa increases α -synuclein DNA methylation in Parkinson's disease patients in vivo and in vitro. *Mov Disord*. 2015 Nov;30(13):1794-801.
3. McCarthy J.J. et al. The effect of SNCA 3' region on the levels of SNCA-112 splicing variant. *Neurogenetics*. 2011 Feb;12(1):59-64.
4. Emelyanov A. et al. SNCA variants and alpha-synuclein level in CD45+ blood cells in Parkinson's disease. *J Neurol Sci*. 2018 Dec 15;395:135-140.

Молекулярно-генетические маркеры развития контрактур

А.Е. Комиссаров¹, И.В. Ткачева^{1,2}, С.В. Саранцева¹

E-mail: tem3650@yandex.ru

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

²Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

Синдром Брука (СБ) характеризуется сочетанием признаков врожденного множественного артрогрипоза и несовершенного остеогенеза. У пациентов с СБ как правило, присутствуют контрактуры суставов, а также хрупкость костей, приводящая к множественным переломам.[1] Этот синдром подразделяется на два типа, СБ1 и СБ2, вызванных мутациями в разных генах: FKBP10 и PLOD2 соответственно. Данные гены кодируют резидентные белки эндоплазматического ретикулула, которые играют важную роль в биосинтезе коллагена I типа, что, в свою очередь, влияет на структуру и прочность соединительных тканей и костей в организме.[2]

Цель работы – поиск мутаций в гене PLOD2 и FKBP10 у пациентов с синдромом Брука.

Для поиска патогенных мутаций у пациентов с синдромом Брука проводилось полноэкзомное секвенирование. Данный метод позволяет обнаруживать как часто встречающиеся, так и редкие мутации. Это особенно важно для исследований редких генетических заболеваний.

В результате исследования были выявлены у одного из пациентов в гене PLOD2 однонуклеотидные замены rs778254905 и rs121434461. Выявленные мутации находятся в компаунд-гетерозиготном состоянии. У четырех пациентов из второй семьи была обнаружена мутация rs1378540661 в гене PLOD2. У больных детей мутация находится в гомозиготном состоянии, а у здоровых мутация находится в гетерозиготном состоянии. У ребенка из третьей семьи были обнаружены однонуклеотидные замены rs387906960 и rs782815501 в гетерозиготном состоянии гена FKBP10. У одного из родителя пациента обнаружена мутация rs782815501 в гетерозиготном состоянии, однако мутации rs387906960 обнаружено не было.

Работа выполнена при поддержке РФФ №23-24-00555

1. Gistelink C. et al. Loss of type I collagen telopeptide lysyl hydroxylation causes musculoskeletal abnormalities in a zebrafish model of Bruck syndrome. // Journal of Bone and Mineral Research.. 2016. V. 31. No. 11. P. 1930-1942.
2. Berg C. et al. Prenatal diagnosis of Bruck syndrome // Prenatal Diagnosis: Published in Affiliation with the International Society for Prenatal Diagnosis. 2005. V. 25. No. 7. P. 535-538.

Оценка ингибирования роста опухолей молочной железы и кишечника путем блокирования VEGFR-1 моноклональными антителами

А.В. Никитина¹, М.С. Биджиева^{1,2}, А.С. Потысьева^{1,2}, Л.А-А. Гараева^{1,2}, А.С. Спицына¹, Е.Д. Путевич^{1,2}, С.С. Емельянова¹, А.В. Волницкий¹, Л.А. Соломина^{1,2}, А.А. Грачев^{1,2}, О.А. Толочева¹, Ж.Ю. Сидорова¹, А.П. Трашков^{1,3}, В.С. Бурдаков¹, Н.А. Верлов^{1,3}, А.Л. Коневега^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,3}

E-mail: nikitina_av@pnpi.nrcki.ru

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

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

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

В современной литературе VEGFR-1 описывается как перспективная мишень для противоопухолевой терапии [1, 2]. Цель исследования – оценить эффективность моноклональных антител к VEGFR-1 для подавления роста опухолей молочной железы (РМЖ) и кишечника (РК) в клеточных и животных моделях.

В работе использовали панель клеточных культур РМЖ и РК человека и мыши. Экспрессию генов *VEGF-A* и *VEGFR-1* во всех клеточных линиях определяли с помощью ОТ-ПЦР. Присутствие VEGFR-1 на поверхности или внутри клеток определяли методом проточной цитометрии. Оценка эффективности ингибирования роста клеток *in vitro* при блокировании VEGFR-1 моноклональными антителами, а также при конкурентном связывании препарата Avastin с VEGF-A в клеточной среде производилась с помощью системы xCELLingence. *In vivo* биораспределение антител к VEGFR-1, меченных Cy7, определяли с помощью системы визуализации Lumotrace. Эффективность подавления роста опухолевого узла при введении исследуемых моноклональных антител к VEGFR-1, а также препарата Авастин проводили на мышах с перевитыми клетками СТ26.

В ходе работы были успешно получены и выделены моноклональные антитела к VEGFR-1. По результатам ИФА были отобраны два наиболее аффинных клона антител. Отобранные моноклональные антитела успешно связываются с антигеном VEGFR-1, уровень экспрессии которого по данным ОТ-ПЦР значителен в линиях РМЖ - MDA-MB-231 и MCF-7, а также в клетках линий РК – Hutu и Lovo. Однако, по результатам цитометрии мембранная форма рецептора VEGFR-1 присутствует на поверхности клеток MDA-MB-231, Hutu и Lovo, в то время для линии MCF-7 большая часть белка выявляется антителами внутри клеток. На всех клеточных линиях была протестирована *in vitro* схема лечения с использованием Авастина, связывающего VEGF-A, и отобранных моноклональных антител к рецептору VEGFR-1. Авастин не влиял на рост клеток SW-480, в которых уровень экспрессии к VEGFR-1 и VEGF-A регистрировался как минимальный среди всех линий; не значительно замедлял рост культур MDA-MB-231 и MCF-7 и значительно подавлял пролиферацию клеток линий Hutu, Lovo и СТ26. Использование антител, связывающих рецептор VEGFR-1, не значительно влияло на пролиферацию клеток линий MCF-7 и SW-480 и значительно подавляло рост линии MDA-MB-231, EMT-6, Hutu, Lovo и СТ26, что может быть связано с наличием антигена VEGFR-1 на поверхности этих клеток. В экспериментах *in vivo* было продемонстрировано накопление антител в перевитых опухолях РК мыши, а также подавление роста опухолевого узла при проведении терапии препаратом Авастин или моноклональными антителами к VEGFR-1. Таким образом, полученные моноклональные антитела имеют сродство к рецептору VEGFR-1 и эффективно ингибируют рост опухолевых клеток РМЖ или РК *in vitro* и *in vivo*.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ (проект 075-15-2021-1360)

1. Ceci C. et al. Role of VEGFs/VEGFR-1 signaling and its inhibition in modulating tumor invasion: Experimental evidence in different metastatic cancer models //IJMS – 2020. – Т. 21. – №. 4. – С. 1388.
2. Lacal, P.M. et al., Therapeutic implication of vascular endothelial growth factor receptor-1 (VEGFR-1) targeting in cancer cells and tumor microenvironment by competitive and non-competitive inhibitors. Pharmacol. Res. 2018, 136, 97–107

Оценка нейропротективного действия метформина

Д.А. Обухова^{1,2}, В.М. Кудринская^{1,3}, Т.В. Тютюник¹

E-mail: obuhowadaria@gmail.com

¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург, Россия

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

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Одной из значимых причин развития когнитивных нарушений являются расстройства дисметаболической природы, такие как сахарный диабет (СД), а в связи с колоссальным ростом заболеваемости СД 2-го типа когнитивные нарушения как проявления не только СД 2-го типа, но и возрастных особенностей организма становятся важнейшей проблемой для населения пожилого возраста. На сегодняшний день молекулярные механизмы развития когнитивных нарушений при СД 2 и при заболеваниях другого генеза, например при болезни Альцгеймера и при болезни Паркинсона, частично раскрыты. Однако появление данных, указывающих на плейотропные эффекты гипогликемических препаратов в отношении когнитивных нарушений, свидетельствует о включении мишеней препаратов данного класса в патогенез нарушения когнитивной функции.

Метформин – лекарственный препарат класса бигуанидов, наиболее часто назначаемый при лечении Сахарного диабета второго типа. Появляется все больше данных о нейропротективном, в частности, противодementных свойствах данного препарата.

Целью данной работы является оценка влияния метформина на когнитивные функции крыс, при скополаминовой модели когнитивных нарушений.

Исследование проходило на 40 самцах крыс линии Вистар, которые методом блочной рандомизации были разделены на четыре группы: группа 1 (контроль), группа 2 (скополамин), группа 3 (метформин) и группа 4 (метформин + скополамин). Группа 1 получала внутрибрюшинно физиологический раствор в дозе 1мл/кг, группы 2 и 4 - скополамин в дозе 1 мг/кг, ежедневно в течение 30 дней. Группы 3 и 4 получали метформин в дозе 100мг/кг перорально ежедневно в течение 30 дней.

Влияние препаратов на пространственную и рабочую память крыс оценивали при помощи поведенческих тестов: «Водный лабиринт Морриса» и «У-образный лабиринт». Данные представляли как среднее ± ошибка среднего; для статистической обработки данных использовали t-тест, проверку на нормальность осуществляли с помощью критерия Шапиро–Уилка.

При хроническом введении скополамина наблюдалось снижение времени нахождения крыс в целевом квадранте в поведенческом тесте «Водный лабиринт Морриса». Однако параллельное введение скополамина и метформина не приводило к нарушениям пространственной памяти животных.

1. Dmitri K., McFarlane Samy I., Sowers James R. Metformin: an update //Ann Intern Med. – 2002. – Т. 137. – No. 1. – С. 25-33.
2. Soukas A. A., Hao H., Wu L. Metformin as anti-aging therapy: is it for everyone? //Trends in Endocrinology & Metabolism. – 2019. – Т. 30. – No. 10. – С. 745-755.

Новый подход в исследовании влияния структур микрофлюидных систем на аналитические характеристики биосенсоров

К.А. Прусаков¹, Р.И. Шакуров^{1,2}, В.К. Куликова¹, В.Н. Конопский³, Ю.А. Беспятых¹,
Д.В. Басманов^{1,2}

E-mail: kaprusakov@gmail.com

¹ФГБУ Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины им. Ю.М. Лопухина
ФМБА России, Москва, Россия

²ФБУН Научно-исследовательский институт системной биологии и медицины Роспотребнадзора,
Москва, Россия

³ФГБУН Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Биосенсоры, работа которых основана на образовании специфического иммуно сэндвича на твёрдой поверхности, занимают важное место среди современных аналитических методик. В научных исследованиях широкое распространение получили биосенсоры на основе поверхностного плазмонного резонанса. В медицинской практике примером такого биосенсора является методика иммуноферментного анализа (ИФА). Для улучшения аналитических характеристик подобных биосенсоров в научном сообществе активно обсуждается идея их интеграции с микрофлюидными системами. Использование микрофлюидных систем потенциально позволяет увеличить чувствительность, сократить время анализа, а также исключить человеческий фактор. В микрофлюидных биосенсорах сенсорная поверхность расположена на одной из внутренних стенок микрофлюидной реакционной камеры. В простейшем случае сенсорная область представляет собой химически модифицированную поверхность стекла или полимера, на которой создан специфический улавливающий слой. В других приложениях сенсорная зона может быть создана, например, на поверхности иммуно-электрода, или иной структуры. Опыт показывает, что при разработке и проектировании новых сенсоров неизбежно возникают вопросы о том, как форма и размеры сенсорной области влияют на аналитические и прикладные характеристики биосенсора, и как на эти характеристики влияют геометрия микрофлюидной реакционной камеры, скорости и распределение потоков жидкостей внутри неё [1]

Целью данной работы являлось развитие метода исследования и визуализации влияния структуры микрофлюидной системы на процессы специфической и неспецифической адсорбции на сенсорную поверхность.

Для решения поставленной цели был предложен новый метод проведения эксперимента с помощью биосенсора на фотонном кристалле с двухмерным пространственным разрешением [2]. Данный метод позволяет исследовать различные микрофлюидные системы, изготовленные из полидиметилсилоксана (ПДМС), стекла и различных пластиков. Преимущество данного метода заключается в том, что он позволяет в реальном времени получать данные о кинетике адсорбции аналитов в различных точках сенсора без необходимости введения в систему дополнительных меток.

С помощью предложенного метода была проведена работа по адаптации геометрии микрофлюидной реакционной камеры с малым отношением глубины камеры к размеру сенсорной области. Полученные результаты могут быть применены при разработке биосенсоров, в которых используются массивы спотов для многопараметрического типирования проб.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ №МК-2988.2022.3

1. Squires T. et al. Making it stick: convection, reaction and diffusion in surface-based biosensors // Nat Biotechnol. 2008. V. 26, P. 417–426.
2. Konopsky V.N. et al. Photonic crystal surface mode imaging for multiplexed and high-throughput label-free biosensing. // Biosensors & bioelectronics. 2020. Nov. 15, V. 168, P. 112575.

Доставка экзогенного белка HSP70 в клетки человека *in vitro* с помощью экстраклеточных везикул микроводорослей

Е.Д. Путевич^{1,3}, Л.А-А. Гараева¹, Е.А. Толстыко¹, А.С. Спицына¹, Л.А. Соломина^{1,3}, И.А. Сизова¹, С.С. Емельянова¹, Е.Ю. Комарова², Т.А. Штам^{1,2}

E-mail: putevich_ed@pnpi.nrcki.ru

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

²Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

Экстраклеточные везикулы (ЭВ) – наноразмерные частицы, окруженные липидным бислоем, переносящие белки и нуклеиновые кислоты. ЭВ представляют собой перспективные системы доставки лекарственных веществ (ЛВ), поскольку могут целенаправленно доставлять молекулы без преждевременной деградации [1]. ЭВ продуцируются практически всеми типами клеток животных и растений. В частности, в данной работе мы исследовали ЭВ, выделенные из микроводорослей. Микроводоросли являются многообещающими продуцентами ЭВ растительного происхождения, поскольку им характерен быстрый рост и высокая плотность, а также условия их культивирования могут быть оптимизированы и стандартизированы [2].

В работе были подобраны условия культивирования микроводорослей, при которых выход секретируемых ЭВ максимален. ЭВ были выделены из культуральной среды при помощи последовательного ультрацентрифугирования с последующей характеристикой везикул по размеру, концентрации и морфологии при помощи атомно-силовой и криоэлектронной микроскопии, анализа траектории наночастиц. Также было продемонстрировано отсутствие цитотоксического действия ЭВ микроводорослей на клетки человека *in vitro* при помощи системы xCELLingence.

Для доказательства перспективности ЭВ микроводорослей как доставщика ЛВ, везикулы были нагружены флуоресцентно меченным белком HSP70-BPY методом ультразвука, и была произведена сравнительная оценка доставки белка с помощью ЭВ к клеткам глиом (Gl-Tr, A172), рака кишечника (Lovo, SW480), аденокарциномы легкого (A549) и эмбриональных почек человека (HEK293) *in vitro*. Эффективность доставки экзогенного белка ЭВ в клетки человека оценивали при помощи проточной цитометрии. Было показано, что белки, доставляемые с помощью ЭВ, более эффективно накапливались в цитоплазме клеток, по сравнению со свободными белками. Результаты исследования показывают, что нативные ЭВ микроводорослей могут быть эффективными доставщиками экзогенных функциональных белков.

Работа выполнена в рамках ГЗ (№ 121060200127-6)

1. Yong Cui, Jiayang Gao, Yilin He, Liwen Jiang. Plant extracellular vesicles. *Protoplasma*. 2020 J; 257(1):3-12.
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.

Потенциал применения антимикробных пептидов в противоопухолевой терапии

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

E-mail: alenarudel@gmail.com

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

Преодоление механизмов устойчивости к лекарственным средствам, в том числе, у опухолевых клеток, является актуальной задачей. Антимикробные пептиды (АМП) системы врожденного иммунитета — перспективная основа для создания препаратов нового поколения. Считается, что противоопухолевые АМП различают нормальные и опухолевые клетки за счет различия в составе мембраны (прежде всего, липидном), в отличие от других противоопухолевых агентов [1], что позволяет обойти основные механизмы устойчивости.

Целью работы был анализ противоопухолевой активности ряда природных АМП для выбора кандидатов для дальнейшей разработки оптимизированных вариантов.

На данном этапе, на культурах опухолевых клеток *in vitro* (глиома крысы С6, глиома человека U-251, лейкемия человека K562) исследовали индивидуальную активность АМП и их сочетанное действие с классическими противоопухолевыми препаратами. Использовали стандартный МТТ-тест; методом регрессионного анализа определяли полумаксимальную ингибирующую концентрацию ИК50. При изучении совместного действия использовали изоболографический метод и расчёт фракционных индексов (иФЭК) [2].

Также провели пилотное исследование *in vivo* на модели асцитной карциномы Эрлиха (АКЭ) мыши. Опухоль индуцировали в двух формах: для солидной мышам подкожно вводили 100 тыс. клеток АКЭ в холку и вводили препараты внутрибрюшинно раз в неделю со 2-го дня до конца эксперимента; при асцитной форме внутрибрюшинно вводили 2 млн клеток АКЭ, а препараты кололи внутрибрюшинно через день 3 раза (со 2-го до 6-го дня). Группы включали 8-10 мышей. Для анализа выживаемости строили кривые Каплана–Мейера и сравнивали с использованием логарифмического рангового критерия. При асцитной форме концентрацию клеток АКЭ в пробах асцитной жидкости оценивали микроскопически в камере Горяева. Результаты сравнивали с помощью U-критерия Манна–Уитни ($p < 0,05$).

По результатам МТТ теста наиболее активными среди выбранных пептидов являются PG-1 (ИК50 4–23 мкМ), BuCath14 (ИК50 10–34 мкМ) и ChVac3.4 (ИК50 27–73 мкМ). В тестах на сочетанное действие с показавшим наибольшую активность АМП – PG-1 – выявлено, что он способен синергически усиливать действие классических противоопухолевых препаратов (доксорубин, актиномицин D, этопозида) *in vitro*. Индекс ФЭК для линии K562 составил 0,25 (доксорубин) и 0,50 (актиномицин D). В отношении устойчивого к доксорубину варианта линии K562 иФЭК с ним достигал 0,375, а для АКЭ – 0,31. Для сочетания PG-1 и этопозида в отношении линии U-251 составил 0,5.

На модели АКЭ мыши *in vivo* структурный вариант ChVac3.4 в дозах 1 и 100 мкг на животное показал статистически значимое повышение продолжительности жизни мышей при солидном варианте опухоли, тогда как для PG-1 (в дозе 5 мкг на животное) значимого эффекта выявлено не было. В сочетании с более низкой активностью ChVac3.4 *in vitro* это может указывать на не прямой (например, иммуномодулирующий) механизм *in vivo*. В то же время, при асцитной форме (имитирующей скорее внутриопухолевое введение), у мышей, получавших PG-1, умерщвленных на 10-й день эксперимента, обнаружено статистически значимое снижение плотности раковых клеток в асцитической жидкости.

Работа выполнена в рамках темы гос. задания: FGWG-2022-0041

1. Tornesello A. L. et al. Antimicrobial peptides as anticancer agents: functional properties and biological activities // *Molecules*. 2020. V. 25. No. 12. P. 2850.
2. Chou T.C., Talalay P. Analysis of combined drug effects: a new look at a very old problem // *Trends Pharmacol. Sci.* 1983. V. 4. P.450–454.

ДНК-связывающие свойства комплексов Cu(II) и Mn(II), содержащих фенантролин

М.П. Шатица¹, Н.А. Касьяненко¹, В.Н. Демидов²

E-mail: st067901@student.spbu.ru

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

²Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия

Синтез и исследование новых противоопухолевых препаратов в настоящее время являются актуальными задачами. С момента изобретения Розенбергом цисплатина начался активный поиск препаратов, которые обладали бы менее выраженными побочными эффектами, наряду с более высокой избирательностью к опухолевым клеткам и эффективностью против цисплатин-резистентных клеточных линий [1].

В настоящее время особый интерес привлекают координационные соединения эндогенных металлов с биологическими лигандами. Так, в отличие от платины, медь и марганец характеризуются высокой биологической совместимостью, что должно способствовать минимизации побочных эффектов. Ожидается, что их координация с активной биологической частью приведет к синергетическому эффекту [2,3].

Фенантролин и его производные представляют значительный интерес из-за их высокой противоопухолевой и противомикробной активности. Благодаря своему строению молекула фенантролина способна связываться с ДНК посредством интеркаляции, что приводит к увеличению длины и жесткости макромолекулы [4].

Основной молекулярной мишенью для действия противоопухолевых препаратов *in vivo* является молекула ДНК, поэтому в работе проводилось сравнение конформационных изменений ДНК при формировании ее комплексов с соединениями меди и марганца, содержащими в координационной сфере две и одну или три молекулы фенантролина, соответственно. Было также рассмотрено взаимодействие свободного фенантролина с ДНК.

В работе использовали коммерческий образец высокомолекулярной тимусной ДНК (Sigma Aldrich) с молекулярной массой 11×10^6 Да. Молекулярная масса определялась вискозиметрически по значению характеристической вязкости в 0.15M NaCl. При проведении экспериментов использовались фильтрованные водно-солевые растворы ДНК (0.005M NaCl). Изучение комплексообразования проводилось с использованием следующих экспериментальных методов: спектрофотометрия, низкоградиентная вискозиметрия, динамическое светорассеяние и двойное лучепреломление в потоке. Было изучено плавление ДНК и проведено спектрофотометрическое титрование. Также было проанализировано влияние ионной силы раствора на комплексообразование.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что исследуемые соединения связываются с ДНК. Можно ожидать, что они проявят биологическую активность и в системах *in vivo*.

Авторы выражают благодарность д.х.н. Демидову В.Н. за предоставленные соединения марганца и меди. Результаты частично получены с использованием оборудования ресурсного Центра диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники СПбГУ

1. Monneret C. Platinum anticancer drugs. From serendipity to rational design //Annales pharmaceutiques francaises. – Elsevier Masson, 2011. – Т. 69. – №. 6. – С. 286-295.
2. Masuri S. et al. Copper (II) phenanthroline-based complexes as potential anticancer drugs: a walkthrough on the mechanisms of action //Molecules. – 2021. – Т. 27. – №. 1. – С. 49.
3. Horning K. J. et al. Manganese is essential for neuronal health //Annual review of nutrition. – 2015. – Т. 35. – С. 71-108.
4. Roy S. et al. Phenanthroline derivatives with improved selectivity as DNA-targeting anticancer or antimicrobial drugs //ChemMedChem: Chemistry Enabling Drug Discovery. – 2008. – Т. 3. – №. 9. – С. 1427-1434.

Изучение мутагенной активности цитозиндезаминаз семейства AID/APOBEC в клетках дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*, несущих мутации по генам гистоновых деацетилаз

А.Е. Шипунова¹, И.В. Зотова^{1,2}, Е.И. Степченкова^{1,2}

E-mail: shipunova287@gmail.com

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

²СПб филиал Института общей генетики им. Н.И. Вавилова РАН, Санкт-Петербург, Россия

В последние годы особое внимание привлекают к себе цитозиндезаминазы семейства AID/APOBEC в связи с появлением доказательств вклада этих белков в развитие злокачественных опухолей. В организме человека цитозиндезаминазы семейства AID/APOBEC выполняют ряд физиологических функций, осуществляя реакцию дезаминирования цитозина до урацила, что приводит к транзициям CG→TA в ходе двух циклов репликации [1]. Цитозиндезаминазы являются эндогенными мутаторами, нарушение регуляции активности дезаминаз может стать причиной неспецифического дезаминирования цитозина в геномной ДНК и запуска онкологической трансформации клетки. Ферменты AID/APOBEC дезаминируют цитозин только в составе одонитевой ДНК или РНК, поэтому можно предположить, что структура хроматина, влияющая на распределение одноцепочечных областей в геномной ДНК, способна влиять на мутагенную активность ферментов AID/APOBEC.

Целью данной работы является изучение мутагенной активности человеческой дезаминазы AID и дезаминазы миноги PmCDA1 в клетках дрожжей *S. cerevisiae*, несущих мутации по генам гистоновых деацетилаз *HST3* и *HST4*.

Гены гистоновых деацетилаз *HST3* и *HST4* отвечают за деацетилирование гистона H3, способствуя поддержанию плотной упаковки хроматина и ограничивают доступность ДНК для дезаминаз. Кроме того, деацетилирование гистонов в ходе ответа клетки на повреждение ДНК играет важную роль в ремоделировании хроматина в ходе репарации и рекомбинации [2]. Мы провели тест на индукцию прямых мутаций устойчивости к канаванину и показали, что делеция генов-мутаторов *HST3* и *HST4* приводит к синергическому возрастанию частоты мутагенеза, зависящего от AID и PmCDA1. Полученные результаты можно объяснить тем, что мутации по генам гистоновых деацетилаз способствуют накоплению одонитевых фрагментов ДНК, которые являются мишенью для AID/APOBEC. В ходе проведенного биоинформатического анализа результатов геномного секвенирования канавагин устойчивых мутантов, индуцированных цитозиндезаминазой PmCDA1 на фоне двойной делеции *hst3Δ hst4Δ*, нам удалось идентифицировать одонуклеотидные замены, вызванные активностью дезаминазы PmCDA1. Количество одонуклеотидных замен в среднем составило 24 замены на геном. Большую часть выявленных мутаций (57 %) составляли замены CG→TA, которые возникли в результате дезаминирования цитозина до урацила и последующего закрепления мутации в ходе репликации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-15-00081

1. Zotova I., Stepchenkova E., Pavlov Y. Contribution of cytosine desaminases of AID/APOBEC family to carcinogenesis // Biological Communications. 2019. № 64(2). С. 110–123.
2. Kadyrova, L. Y., Mertz, T. M., Zhang, Y., Northam, M. R., Sheng, Z., Lobachev, K. S., Shcherbakova, P. V., & Kadyrov, F. A Reversible Histone H3 Acetylation Cooperates with Mismatch Repair and Replicative Polymerases in Maintaining Genome Stability // PLoS Genet. - 2013. - №9(10).

Ассоциация варианта rs6511720 гена *LDLR* с уровнем холестерина липопротеинов низкой плотности у пациентов с подозрением на семейную гиперхолестеринемию и потенциал его учета при разработке диагностических шкал полигенного риска

А.Ф. Широков¹, П.А. Сучко², И.А. Побожьева^{3,4}, К.В. Драчева^{3,4}, М.В. Музалевская^{5,6}, С.А. Уразгильдеева^{5,6}, В.С. Гуревич^{5,6}, С.Н. Пчелина^{3,4}, В.В. Мирошникова^{3,4}

E-mail: shirokov_alexander@yahoo.com, v.v.mirosh@gmail.com

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт, Санкт-Петербург, Россия

³Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

⁴Первый Санкт-Петербургский Государственный Медицинский Университет им. акад. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

⁵Центр атеросклероза и нарушений липидного обмена ФГБУ ФГБУ «СЗО НКЦ им. Л.Г. Соколова», Санкт-Петербург, Россия

⁶Научно-клинический и образовательный центр «Кардиология» Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия

Семейная гиперхолестеринемия (СГХ) – распространенное генетическое заболевание (частота гетерозиготной формы 1:200), с аутосомно доминантным типом наследования, характеризующееся повышенным содержанием в крови холестерина липопротеинов низкой плотности (Х-ЛПНП) и высоким риском развития сердечно-сосудистой патологии. Часть случаев СГХ имеют полигенную природу, что обуславливает сложность их своевременного выявления. Одним из подходов к увеличению предсказательной ценности генетического тестирования при СГХ является разработка шкал генетического риска (ШГР) [1].

Цель работы: оценка взаимосвязи ШГР на основе вариантов генов *LDLR* (rs6511720), *APOB* (rs1367117), *ABCG5/G8* (rs6544713), *APOE* (rs429358 и rs7412), *CELSR2* (rs629301) с показателями липидного спектра у пациентов с предполагаемым диагнозом СГХ.

В исследование были включены 76 пациентов с диагнозом возможная/вероятная/определенная СГХ. Для идентификации вышеперечисленных генетических вариантов были разработаны методы на основе ПЦР (аллель-специфическая ПЦР или ПЦР-ПДРФ). Был осуществлён поиск комбинации генетических вариантов, оценка которых может быть связана с показателями липидного спектра. Значение ШГР для каждого пациента вычислялось как сумма эффектов каждого варианта, взвешенного по силе эффекта, с применением b-коэффициентов, определенных по результатам GWAS. Статистическая обработка результатов проводилась в программе SPSS 17.0.

Показано, что в подгруппе пациентов, имеющих 6 и менее баллов согласно голландским диагностическим критериям СГХ, носители аллеля Т имеют более низкую концентрацию общего холестерина (ОХС) и Х-ЛПНП в крови по сравнению с носителями генотипа GG гена *LDLR* (rs6511720). Протективный эффект данного варианта может быть обусловлен его влиянием на экспрессию гена, т.к. он локализован в зоне антисмысловой РНК *LDLRAS1* [2]. Предложена ШГР5, учитывающая суммарный вклад rs6511720 и наиболее важных ОНП генов, связанных с уровнем Х-ЛПНП: *APOB*, *ABCG5/G8* и *APOE*. Значение ШГР5 положительно коррелирует с концентрацией ОХС и Х-ЛПНП в подгруппе пациентов, имеющих 6 и менее баллов согласно голландским диагностическим критериям. Таким образом, ШГР5 потенциально может использоваться для диагностики полигенной СГХ.

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

1. Futema M., Shah S., Cooper J.A., et al. Refinement of variant selection for the LDL cholesterol genetic risk score in the diagnosis of the polygenic form of clinical familial hypercholesterolemia and replication in samples from 6 countries // Clin Chem. - 2015. - Vol.61, No.1. - P.231-8.
2. Selvaraj M.S., Li X., Li Z., Pampana A. et al. Whole genome sequence analysis of blood lipid levels in >66,000 individuals // Nat Commun. - 2022. - Vol.13, No.1. - P.5995.

Comparative Study of Acute and Delayed Effects of Neonatal IL-1 β and LPS Administration on Neuroplasticity Gene Expression in Rats

E.A. Shirokov^{1,2}, E.A. Kim^{1,3}, V.A. Nikitina¹, A.P. Schwarz⁴, O.E. Zubareva⁴, I.N. Abdurasulova¹, V.M. Klimenko¹, A.N. Trofimov¹

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

¹Institute of Experimental Medicine, St. Petersburg, Russia

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

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

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

Inflammatory stress and infectious diseases experienced in early postnatal ontogeny can impair normal CNS development and facilitate predisposition towards cognitive dysfunction later in life [1,2]. Various proinflammatory cytokines, particularly interleukin (IL)-1 β , are key mediators of these events [3], while changes in the expression of neuroplasticity genes present one of possible molecular mechanisms of such adverse outcomes. Growth factor proteins, such as BDNF and FGF-2, and brain proteolytic system components, such as MMP-9 protease and its inhibitor TIMP-1, are some of the products of these genes. The most commonly used model for simulating early postnatal inflammatory stress involves the administration of bacterial lipopolysaccharide (LPS) to rodents [4], but a direct comparison of the effects of LPS and IL-1 β administration on the expression of neuroplasticity genes has not been previously performed.

This study examined and compared both immediate and delayed effects of course administration of moderate-pyrogenic doses of LPS and IL-1 β during the third week of life on the expression of *Bdnf*, *Fgf2* genes, and the expression ratio of *Mmp9* to *Timp1* in medial prefrontal cortex (mPFC) and dorsal hippocampus (DH) of male Wistar rats. Tissue samples were collected either 2 hours after the completion of the administration course or in adulthood, and RT-qPCR was used to measure gene expression. Two of the most stably expressed genes among the candidate genes (*ActB*, *Gapdh*, *B2m*, *Rpl13A*, *Sdha*, *Ppia*, *Hprt1*, *Pgk1*, *Ywhaz*) were selected as reference using RefFinder, and statistical analysis was performed using one-way ANOVA with post-hoc pairwise comparison ($p < 0.05$).

The results showed that suitable reference genes for mPFC of pups were *Pgk1* and *B2m*, for mPFC of adult animals – *Hprt1* and *B2m*, for DH of pups – *B2m* and *Rpl13a*, for DH of adult animals – *Pgk1* and *Sdha*. A significant increase in the expression level of *Fgf2* was observed in mPFC of pups subject to IL-1 β administration in comparison both to control and LPS groups, while in adult rats' mPFC *Fgf2* expression level was significantly decreased in LPS group, compared both to control and IL-1 β groups. In the DH of adult rats expression ratio of *Mmp9* to *Timp1* was significantly decreased in LPS group, compared both to control and IL-1 β groups.

It can be concluded, that IL-1 β - and LPS-induced models of early postnatal inflammation result in differential changes in the expression of various neuroplasticity-related genes, which stresses the need for caution when comparing results obtained with the use of these models.

1. Bilbo S.D., Schwarz J.M. Early-life programming of later-life brain and behavior: A critical role for the immune system // *Front. Behav. Neurosci.* 2009. Vol. 3, № AUG. P. 1–14.
2. Zubareva O.E. et al. The effects of proinflammatory cytokines on the formation of behavior in early postnatal ontogenesis // *Neurosci. Behav. Physiol.* 2006. Vol. 36, № 4. P. 367–372.
3. Yirmiya R., Goshen I. Immune modulation of learning, memory, neural plasticity and neurogenesis. // *Brain. Behav. Immun.* 2011. Vol. 25, № 2. P. 181–213.
4. Batista C.R.A. et al. Lipopolysaccharide-Induced Neuroinflammation as a Bridge to Understand Neurodegeneration // *Int. J. Mol. Sci.* 2019. Vol. 20, № 9. P. 2293.

Тест-система для оценки активности цитозиндезаминаз семейства AID/APOBEC на основе штаммов дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*, экспрессирующих человеческий ген APOBEC3A

А.А. Шурова¹, Е.В. Кравцова², И.В. Зотова^{1,3}, Е.И. Степченкова^{1,3}

E-mail: ShurovaAlyona2003@gmail.com

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

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

³СПб филиал Института общей генетики им. Н.И. Вавилова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Цитозиндезаминазы семейства AID/APOBEC – ферменты, осуществляющие реакцию дезаминирования цитозина до урацила в составе одноцепочечной ДНК или РНК. Один из наиболее значимых представителей данного семейства – белок APOBEC3A (A3A). A3A в норме участвует в противовирусной защите человека посредством деаминации цитозина в вирусном геноме, что в конечном итоге приводит к появлению множества мутаций CG → TA и деградации вирусного генома [1]. Нарушение регуляции активности A3A потенциально может являться мутагенным и канцерогенным фактором, поскольку при сверхпродукции этого белка, он может дезаминировать цитозин не только в вирусном геноме, но и в геноме клеток человека. Так, мутационные подписи A3A обнаружены в геноме опухолевых клеток у больных раком груди, поджелудочной железы, мочевого пузыря [2].

Целью данной работы является создание модельной системы для изучения действия дезаминазы человека APOBEC3A на чужеродную ДНК.

У дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* отсутствуют собственные дезаминазы семейства AID/APOBEC, что делает эти микроорганизмы удобным модельным объектом для изучения активности человеческого белка A3A, при его гетерологичной продукции в дрожжевых клетках. В ходе работы были созданы штаммы дрожжей, несущие мутации *leu2* и *ura3* и экспрессирующие человеческий ген *APOBEC3A* дикого типа и его мутантную аллель с однонуклеотидной заменой, которая кодирует белок, полностью лишенный дезаминазной активности. Для имитации вирусной инфекции оба штамма трансформировали плазмидой pRS315-URA3, несущей два селективных маркера – гены *LEU2* и *URA3*, которые позволяют отбирать трансформантов на селективной среде без лейцина или урацила соответственно, а также оценивать частоту мутаций в одном из указанных репортерных генов в неселективных условиях. Мы показали, что эффективность трансформации штаммов, экспрессирующих ген активной A3A, в 30 раз ниже, чем в контрольном штамме, несущем мутантную аллель гена дезаминазы A3A. Таким образом, эффективность трансформации в созданной тест-системе отражает активность цитозиндезаминазы, направленной против чужеродной ДНК. Мы полагаем, что снижение эффективности трансформации у штаммов с активной дезаминазой может быть связано с накоплением в плазмиде повреждений или мутаций. На основе созданной нами тест-системы были разработаны методические подходы, для выяснения механизма, лежащего в основе снижения эффективности трансформации при проникновении чужеродной ДНК в клетку. Эти подходы могут быть использованы в дальнейших исследованиях, направленных на поиск экзогенных и эндогенных факторов, влияющих на активность дезаминазы A3A и других ферментов этого семейства.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-15-00081

1. Zotova I., Stepchenkova E., Pavlov Y. Contribution of cytosine desaminases of AID/APOBEC family to carcinogenesis // Biological Communications. 2019. № 64(2). С. 110–123.
2. Alexandrov L.B., Kim J., Haradhvala N.J., Huang M.N., Tian Ng A.W., Wu Y., Boot A., Covington K.R., Gordenin D.A., Bergstrom E.N., et al. The repertoire of mutational signatures in human cancer // Nature. 2020. № 578. С. 94–101.

Изучение белков, входящих в PML-тельца, с точки зрения процесса фазового разделения жидкость-жидкость

Е.Ю. Смирнов¹, С.А. Силонов¹, Е.М. Неделяев¹, Я.И. Мокин¹, А.В. Фонин¹, К.К. Туроверов¹

E-mail: e.smirnov@incras.ru

¹*Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия*

В последние годы вопросы функционирования и образования немембранных органелл привлекают все больше и больше внимания. PML-тельца – это немембранные органеллы, расположенные в нуклеоплазме и участвующие в широком спектре различных процессов, таких как подавление роста опухоли, стабильность генома, транскрипцию, организацию хроматина и др. На данный момент считается, что в состав каркасных белков PML-телец входят 4 основных белка: PML, DAXX, CREBB(CBP) и SP100 [1]. Механизм образования PML-телец является слабо изученным. Предполагается, что основными движущими факторами в образовании PML-телец являются SUMO-SIM взаимодействия и образование дисульфидных связей, однако в последние годы появляется все больше информации об участии процесса фазового разделения жидкость-жидкость (LLPS) в биогенезе PML-телец [2]. В данной работе собрана информация о белках, способных входить в состав PML-телец, а также описаны их физико-химические характеристики с помощью широкого спектра предикторов.

Нами собрана информация об интерактантах PML в литературных источниках, дополнена информацией из баз данных BIOGRID и UniProt (GO). Полученный список белков был проанализирован на склонность к фазовому разделению, на предмет различных физико-химических характеристик связанных с процессом фазового разделения жидкость-жидкость. Было обнаружено, что из 205 белков интерактантов PML, подтвержденных по литературе, 85% являются внутренне неупорядоченными белками, а 50% являются склонными к LLPS, что говорит о большом вкладе этого процесса в образование и функционирование PML-телец.

Также были проанализированы интерактомы четырех белков оболочки, взятые из базы данных BIOGRID, и проверены пересечения интерактантов этих белков. Были обнаружены 4 новых белка, которые потенциально могут входить в оболочку PML-телец. Наши данные существенно дополняют знания о биогенезе PML-телец и роли LLPS в этом процессе.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-15-00429

1. P. Xu and B. Roizman, “The SP100 component of ND10 enhances accumulation of PML and suppresses replication and the assembly of HSV replication compartments,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 114, no. 19, pp. E3823–E3829, May 2017, doi: 10.1073/pnas.1703395114.
2. A. Corpet et al., “PML nuclear bodies and chromatin dynamics: catch me if you can!,” *Nucleic Acids Res*, vol. 48, no. 21, pp. 11890–11912, Dec. 2020, doi: 10.1093/nar/gkaa828.

Регенеративные свойства везикул растительного происхождения

Л.А. Соломина^{1,2}, Л.А. Гараева¹, С.С. Емельянова¹, Е.Д. Путевич^{1,2}, А.Л. Коневега^{1,2}, Т.А. Штам¹
E-mail: solomina.la@edu.spbstu.ru

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

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

В настоящее время экзосомы животного происхождения (ЭВ) хорошо изучены и активно используются в лечебных и косметологических целях, однако в силу трудоемкости производственного процесса, препараты на их основе малодоступны, что приводит к поиску схожих по свойствам и характеристикам частиц-доставщиков. Таковыми могут послужить растительные экстраклеточные везикулы (РЭВ). Они окружены липидным бислоем, участвуют в межклеточной коммуникации, являясь переносчиками биологически активных молекул (белки, нуклеиновые кислоты, липиды, антиоксиданты) [1]. РЭВ, как и ЭВ, благодаря своему размеру способны проникать глубоко в кожу и стимулировать синтез белков, полисахаридов внеклеточного матрикса в дермальных фибробластах, клетках, отвечающих за восстановление поврежденных участков соединительных тканей [2].

Целью данной работы является оценка влияния растительных везикул огурца и томата на пролиферативную активность кожных фибробластов после их механического повреждения.

Для решения этой задачи из сока огурца и томата методом дифференциального центрифугирования были выделены везикулы. Клетки линий дермальных фибробластов человека (DF-2) высаживали на планшеты, дорацивали до монослоя и наносили сеть царапин стерильным наконечником. Далее добавляли свежую среду, содержащую РЭВ в концентрации 2×10^{11} частиц/лунку и инкубировали 24 часа. Выживаемость клеток оценивали с помощью МТТ-теста. Экспрессию генов гиалуронансинтаз 1 и 2 типа (*HAS1*, *HAS2*) и эластина (*ELN*) оценивали с помощью ОТ-ПЦР в реальном времени.

По результатам МТТ-теста РЭВ огурца и томата повышали жизнеспособность стимулировали пролиферацию кожных фибробластов линии DF-2 в 4 и 3 раза соответственно. С помощью ОТ-ПЦР было выявлено, что РЭВ огурца и томата увеличивали экспрессию генов *HAS1*, *HAS2* и *ELN*, активно участвующих в регенерации кожи.

При повреждении клеток активировалась экспрессия генов *HAS2* и *ELN*. РЭВ дополнительно повышали экспрессию этих генов в 2-2,5 раза для *HAS2* и в 1,5-2 для *ELN*, а также активировали экспрессию гена *HAS1*.

Выводы:

1. РЭВ огурца и томата повышают выживаемость поврежденных клеток линии DF-2.
2. РЭВ огурца и томата увеличивают экспрессию генов *HAS2*, *ELN* и активируют экспрессию гена *HAS1* как в контрольных, так и в поврежденных клетках линии дермальных фибробластов человека, DF-2.

Работа выполнена в рамках ГЗ (№ 121060200127-6)

1. Manho Kim, Hyejun Jang et al. Therapeutic Applications of Plant-Derived Extracellular Vesicles as Antioxidants for Oxidative Stress-Related Diseases// Antioxidants. 2023. V. 12. No. 6. P. 1286.
2. Lauren E. Tracy, Raquel A. Minasian, E. J. Caterson Extracellular Matrix and Dermal Fibroblast Function in the Healing Wound// Advances in Wound Care. 2016. V. 5. No. 3. P. 119-136.
3. Eunji Kim, Kyeonghwan Hwang, Jongsung Lee et al. Skin Protective Effect of Epigallocatechin Gallate// Int. J. Mol. Sci. 2018. V. 19. N. 1 P. 173.

Генетическая характеристика новых клеточных линий глиобластом и оценка их чувствительности к радиотерапии

А.М. Соляник^{1,2}, С.С. Емельянова¹, А.В. Волницкий¹, М.Н. Грунина¹, Н.Х. Чан^{1,2}, А.М. Голубев¹,
Д.В. Лебедев^{1,3}, Р.А. Пантина¹, С.Н. Нарыжский¹, А.Л. Коневега^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,3}

E-mail: solyanik.am@edu.spbstu.ru

¹ФГБУ «Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова Национального Исследовательского Центра «Курчатовский Институт», Гатчина

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

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Глиобластома — опухоль головного мозга IV степени злокачественности, клетки которой отличаются по морфологии, фенотипу и генетическим особенностям как у разных пациентов, так и внутри опухоли, и в настоящее время является неизлечимым заболеванием с быстрым смертельным исходом. Получение и исследование новых клеточных линий глиобластом позволит повысить эффективность существующих схем терапии и разработать новые.

Одним из наиболее важных для глиом молекулярных маркеров, который позволяет определить прогноз пациента и выбрать стратегию лечения, является статус изоцитратдегидрогеназ IDH1 и IDH2. Мутации в этих генах найдены в 70-80% диффузионных астроцитом II-III степени злокачественности, олигодендроглиомах и вторичных глиобластомах, но почти не встречаются в первичных глиобластомах [1]. Еще одним маркером является статус транскрипционного фактора p53, который способен вызывать апоптоз клеток с генетическими повреждениями. Показано, что в первичных глиобластомах мутации гена TP53 наблюдаются реже, чем во вторичных. Белок p73 является гомологом p53 и регулирует экспрессию ряда общих с ним генов-мишеней.

В лаборатории клеточной биологии НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ из опухолевой ткани пациентов были получены новые клеточные линии глиобластом. Целью данной работы была генетическая характеристика этих линий и оценка их чувствительности к радиотерапии.

Секвенированием по Сэнгеру определяли наличие мутаций в генах IDH1, IDH2 и TP53; с помощью ОТ- ПЦР в реальном времени детектировали экспрессию изоформ гена TP73; с помощью MTS-теста и окрашивания колоний исследовали влияние гамма- и рентгеновского излучения на выживаемость клеток.

Мутации в генах IDH1 и IDH2 не были выявлены ни в одной из исследованных линий. В двух линиях была найдена малоизученная мутация p.Arg110Pro в ДНК-связывающей области белка p53 [3]. Экспрессия p73 наблюдалась во всех исследованных линиях. В одной из линий не было основной изоформы p73, а в двух других экспрессия укороченных изоформ была повышенной относительно экспрессии основной изоформы. Одна из линий оказалась значительно более чувствительной к рентгеновскому и гамма-излучению, чем остальные.

Таким образом, выявленные различия в поведении и молекулярных характеристиках новых линий позволят более объективно и детально подойти к изучению молекулярных механизмов, связанных с развитием глиобластом, и разработке новых способов противоопухолевой терапии.

Работа выполнена в рамках ГЗ (№ 121060200127-6)

1. Ludwig K., Kornblum H. I. Molecular markers in glioma //Journal of neuro-oncology. – 2017. – Т. 134. – С. 505-512.
2. Mitchell G. et al. High frequency of germline TP53 mutations in a prospective adult-onset sarcoma cohort //PloS one. – 2013. – Т. 8. – №. 7. – С. e69026.

Перспективы использования пептида рНЛIP в качестве агента тераностики

*А.С. Спицына¹, Д. С. Виноградова¹, В.С. Бурдаков¹, А. В. Волницкий¹, Я. Ю. Марченко¹,
Л.Ю. Яковлева¹, Л.А.-А. Гараева¹, Е.Ю. Варфоломеева¹, А.И. Титов¹, К.А. Шабалин¹, А.Л.
Коневга^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,2}*

E-mail: anastasis.8@yandex.ru

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

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

Известно, что микроокружение опухолевых тканей имеет более низкие значения кислотности среды, по сравнению с нормальными тканями [1]. Подобные условия являются потенциальной основой таргетной доставки терапевтических и диагностических препаратов. Среди которых – рНЛIP (pH low insertion peptide) – пептид, способный менять конформацию и образовывать альфа-спираль, встраиваемую в клеточную мембрану при низких значениях рН межклеточной среды [2].

Цель нашего исследования – изучить границы применимости рНЛIP в тераностике: для целевой доставки в опухолевые клетки радиосенсибилизирующих наночастиц оксида железа [3], радиофарм препаратов [4], наконец, нагрузка мiРНК и siРНК в экзосомы, для доставки последних в раковые клетки [5]. Начальной задачи нашего исследования явилась необходимость изучить трансмембранный механизм встраивания рНЛIP в клетки.

Мы оценивали конформационное поведение пептида с помощью метода нанодифференциальной сканирующей флуорометрии. Затем рНЛIP, конъюгированный с флуоресцентной меткой BODIPY на N-конце, инкубировали со следующими клеточными линиями: RLC (лимфосаркома крысы), SP2/0-Ag14 (миелома мыши), СТ-26 (аденокарцинома кишечника мыши), А-549 (аденокарцинома лёгкого человека) – при различных значениях рН. Далее образцы исследовали методами проточной цитометрии и конфокальной микроскопии.

Конформационные изменения пептида при рН<7 однозначно указывали на образование альфа-спирали. Однако трансмембранные исследования не отразили разницу между конформацией пептида в кислых и нормальных условиях: в обоих случаях флуорофор, расположенный на N-конце пептида, локализовался на мембране исследуемых клеток. Последнее не отменяет возможность использования рНЛIP в качестве доставщика, но указывает на необходимость учитывать влияние как кислотности среды, так и мембранного состава клеток.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ (проект 075-15-2021-1360)

1. Tannock I.F. et al. Acid pH in tumors and its potential for therapeutic exploitation// Cancer Res. 1989. V. 49. №16. P. 4373-84.
2. Y. K. Reshetnyak et al. Translocation of molecules into cells by pH-dependent insertion of a transmembrane helix// Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2006. V. 103, №17. P. 6460–6465.
3. Alexandra G. Pershina. et al. pH-triggered delivery of magnetic nanoparticles depends on tumor volume// Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine. 2020. V. 23.
4. Zhang, Min & Xi et al. In Vivo Distribution and Therapeutic Efficacy of Radioiodine-Labeled pH-Low Insertion Peptide Variant 3 in a Mouse Model of Breast Cancer// Molecular Imaging. 2022.
5. Yunfeng Di et al. Recent engineering advances of EVs for compounds, nucleic acids, and TCM delivery// European Journal of Pharmaceutical Sciences. 2023. V.190.

Профиль экспрессии генов *CD25*, *FOXP3*, *IL10*, *LRRC32* и *TNFRSF4* в жировой ткани связан с ожирением и сахарным диабетом 2 типа

М.А. Сурицкова¹, М.Н. Грунина¹, 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}

E-mail: msurcukova@mail.ru

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

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

Развитие инсулинорезистентности и сахарного диабета 2 типа (СД2) при ожирении ассоциировано с хроническим воспалением, которое протекает с инфильтрацией жировой ткани (ЖТ) иммунными клетками и сокращением при этом популяции регуляторных Т лимфоцитов (Трег) [1,2]. Поэтому исследование роли субпопуляции Трег в контроле над воспалением в ЖТ и поиск биомаркеров для оценки их активности в ЖТ является крайне актуальным.

Цель работы: сравнительный анализ уровня экспрессии генов *FOXP3*, *CD25*, *IL10*, *LRRC32*, *TNFRSF4*, который может отражать активность Трег, в подкожной и висцеральной жировой ткани (ПЖТ и ВЖТ) у пациентов с ожирением и СД2 и у лиц контрольной группы с нормальной массой тела.

В исследование были включены 26 пациентов с ожирением и СД2 (индекс массы тела (ИМТ)>35) и 15 лиц без ожирения (контрольная группа, ИМТ<30). Для выделения РНК из ЖТ использовали реагент Qiazol (Qiagen), далее полученную РНК обрабатывали ДНКазой (DNase I, RNase-free, Thermo Fisher Scientific) для удаления примесей геномной ДНК, после чего проводили реакцию обратной транскрипции с использованием набора реагентов MMLV RT kit (Евроген), а синтезированную кДНК использовали для оценки уровня мРНК методом ПЦР в реальном времени на приборе CFX96 Real time System (BIO RAD), в качестве референсных генов использованы *RPLP0* и *ACTB*. Статистическую обработку выполняли в программе SPSS 21.0.

При ожирении и СД2 продемонстрировано увеличение экспрессии в ПЖТ для генов *LRRC32*, *TNFRSF4*, *CD25* ($p<0,05$) и *IL10* ($p<0,001$) при отсутствии значимых изменений в уровне экспрессии гена основного транскрипционного фактора, контролирующего созревание и активацию Трег, *FOXP3*. Ассоциации экспрессии вышеуказанных генов в ВЖТ с ожирением и СД2 не выявлено. Для группы пациентов с ожирением и СД2 продемонстрированы корреляционные связи со следующими параметрами: уровень мРНК генов *TNFRSF4*, *CD25* и *FOXP3* в ВЖТ положительно коррелировал с уровнем С-пептида в плазме крови ($r>0,5$, $p<0,05$); уровень мРНК *FOXP3* в ВЖТ положительно коррелировал с уровнем инсулина в плазме крови ($r = 0,62$, $p = 0,005$); уровень мРНК генов *LRRC32*, *TNFRSF4* и *FOXP3* в ПЖТ отрицательно коррелировал с ИМТ ($r<-0,4$, $p<0,05$). Таким образом профиль экспрессии генов, отражающих активность иммунных клеток в ЖТ, ассоциирован с ожирением и метаболическими нарушениями.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-25-00207

1. Chen L., Chen R., Wang H., Liang F. Mechanisms Linking Inflammation to Insulin Resistance. Int J Endocrinol. 2015. V. 2015. P. 508409.
2. Wang Q., Wu H. T Cells in Adipose Tissue: Critical Players in Immunometabolism. Front Immunol. 2018. V. 9. P. 2509.

Спектр спонтанных репарационных мутаций у мутанта по гену ASF1 *Saccharomyces cerevisiae*

А.В. Торошина¹, Д.В. Федоров¹, В.Т. Пешехонов¹, В.Г. Королев¹

E-mail: toroshchina_av@pnpi.nrcki.ru

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

Клеточный геном функционирует в условиях постоянного воздействия экзогенных и эндогенных факторов, вызывающих повреждения ДНК. По оценкам, в течение одного клеточного цикла эукариотические клетки должны репарировать более 10000 повреждений ДНК, возникающих только в результате эндогенных источников повреждений, таких как активные формы кислорода, эндогенные алкилирующие агенты и т.д. Не репарированные генетические повреждения приводят к возникновению мутаций, генетической нестабильности, возникновению раковых заболеваний и клеточной гибели. Ранее в нашей лаборатории впервые в мире с помощью прямого скрининга были выделены мутанты дрожжей, отличающихся повышенным индуцированным мутагенезом и практически не измененной чувствительностью к летальному действию мутагенов. Было показано, что причиной повышенного мутагенеза у этих мутантов является привлечение часто ошибающихся ДНК полимераз в ходе репаративного синтеза ДНК. На основании этих данных мы сделали вывод, что подобные мутанты могут с успехом использоваться для создания тест-систем для оценки различных генотоксических веществ и обнаружения генотоксикантов в окружающей среде. Мутант *asf1* оказался одним из самых перспективных для данной цели.

Для оценки перспективности мутанта *asf1* нам потребовалось определить спектр спонтанных мутаций, возникающих при замедленном росте на селективной среде. Для этого мы отобрали мутантов *can1*, устойчивых к аналогу аргинина канаванину, и проанализировали спектр полученных мутаций в гене *can1*. В процессе исследования мы столкнулись с неожиданным эффектом, который позволил увеличить эффективность отбора нужных нам мутантов *can1*.

В дальнейшем результаты нашей работы будут использованы в разработке технологии выявления генотоксичности для увеличения чувствительности тестирующих штаммов дрожжей, которая будет представлена для регистрации результатов интеллектуальной деятельности (патента).

Работа выполнена при поддержке центра геномных исследований «Курчатовский геномный центр – ПИЯФ»

1. Evstyukhina TA, Alekseeva EA, Fedorov DV, Peshekhonov VT, Korolev VG (2021) Genetic analysis of the Hsm3 protein function in yeast *Saccharomyces cerevisiae* NuB4 complex. *Genes* 12:1083. <https://doi.org/10.3390/genes12071083>
2. Alekseeva EA, Evstyukhina TA, Peshekhonov VT, Korolev VG (2021) Participation of the HIM1 gene of yeast *Saccharomyces cerevisiae* in the error-free branch of post-replicative repair and role Poln in him1-dependent mutagenesis. *Curr Genet* 67:141-151. <https://doi.org/10.1007/300294-020-01>] 15-6
3. Kelberg EP, Kovaltsova SV, Alekseev SYu, Fedorova IV, Gracheva LM, Evstukhina TA, Korolev VG (2005) HIM1, a new yeast *Saccharomyces cerevisiae* gene playing a role in control of spontaneous and induction mutagenesis, *Mutation Research* 578:264-78. <https://doi.org/10.1016/j.mrfnm.2005.03.003>

Применение суперпарамагнитных наночастиц оксида железа для сенсбилизации при лучевой терапии глиом

Н.Х. Чан^{1,2}, В.А. Рыжов¹, А.В. Волницкий¹, Д.А. Амерканов^{1,3}, Ф.А. Пак^{1,3}, А.М. Голубев¹, Д.В. Лебедев^{1,3}, А.Л. Коневега^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,3}, Я.Ю. Марченко¹

E-mail: nhanhau.tran92@gmail.com

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

Глиома является наиболее распространенной злокачественной первичной опухолью головного мозга. На её долю приходится почти 30% всех первичных опухолей головного мозга, и большинство случаев смерти от них [1]. Лучевая терапия используется в послеоперационной терапии глиом. Потенциал стандартных методов лучевой терапии ограничен дозой, которая может быть безопасно доставлена в опухоль, но может оказаться недостаточной для эффективного лечения. Эффективность дозы можно повысить с помощью радиосенсибилизаторов. В качестве возможных радиосенсибилизаторов рассматриваются суперпарамагнитные наночастицы оксида железа [2].

Целью данной работы является изучение совместного действия наночастиц оксида железа и различных типов ионизирующего излучения на культивируемые клетки глиом.

В этом исследовании мы изучали радиосенсибилизирующий потенциал биосовместимых наночастиц оксида железа в декстрановой оболочке на линиях клеток глиом A172 и GI-Tr *in vitro*. Клетки, предварительно инкубированные с наночастицами в течение 24 ч, подвергали воздействию рентгеновского излучения с энергией 35 КэВ, гамма-излучения с энергией 1.2 МэВ или протонов (с энергией 200 МэВ) на пике Брэгга в диапазоне доз 0,5–6 Гр, а их жизнеспособность оценивали с помощью метода AlamarBlue и последующего окрашивания выживших клеток кристаллическим фиолетовым. Значительный эффект радиосенсибилизации наночастицами наблюдался в обеих линиях при воздействии на клетки рентгеновским излучением. В гамма диапазоне слабый радиосенсибилизирующий эффект был обнаружен только в линии GI-Tr, а при облучении протонами на пике Брэгга эффект отсутствовал. Совместная инкубация клеток с наночастицами приводила лишь к незначительному увеличению уровня активных форм кислорода (около 10%) после рентгеновского облучения. При этом известно, что рентгеновское излучение в данном диапазоне энергий генерирует значительное количество вторичных электронов на Fe₃O₄-ядре наночастиц за счет фотоэффекта. Таким образом, результаты позволяют предположить, что радиосенсибилизирующий эффект, вызванный поглощенными опухолевыми клетками наночастицами, вероятно, связан не столько с активными формами кислорода, сколько со вторичными электронами, генерируемыми магнетитным ядром наночастиц при облучении.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда Грант № 23-25-00273, <https://rscf.ru/project/23-25-00273/>

1. Weller, M., et al. Glioma // Nature reviews Disease primers. 2015. V. 1(1). P. 1-18.
2. Russell, E, et al. Impact of superparamagnetic iron oxide nanoparticles on in vitro and in vivo radiosensitisation of cancer cells // Radiation Oncology. 2021. V. 16(1). P. 1-16.

Церебральные эффекты глюкокортикоидов

Т.В. Тютюник, В.В. Киренская, В.М. Кудринская, И.Р. Назаров, Д.О. Обухова, В.С. Артемова

E-mail: t.tanjon11@yandex.ru

ФГБНУ Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

Гипоталамо-гипофизарно-надпочечниковая система считается основным регулятором стрессового ответа в организме, а ее эффекторными молекулами являются глюкокортикостероиды (ГК). ГК также являются модуляторами воспаления и имеют противовоспалительное действие на периферии организма. Известно, что при длительном повышении содержания ГК в крови может вызывать спонтанное нейровоспаление в мозге, а в частности в гиппокампе [1, 2]. Ранее мы показали, что в следствие введения дексаметазона в дозе 8 мг/кг уменьшается количество эндогенного медиатора стресса, глюкокортикоида кортикостерона, у крыс в крови, что неизбежно приведет к изменению цитокинового профиля. Поэтому мы рассматриваем влияние периферического введения дексаметазона в дозе 8 мг/кг на развитие нейровоспаления в гиппокампе крыс.

В эксперименте использовались 32 половозрелых самцов крыс Wistar, которых случайным образом распределили на 8 групп по 4 голов в каждой. Животным вводился дексаметазон в дозе 8 мг/кг и производилась декапитация на разных сроках (1, 3, 9, 12, 18, 24, 48 часов – время декапитации после введения, группа 0 – контрольная группа с введением физ. раствора). В ходе нашего исследования мы использовали метод Real-time ПЦР с обратной транскрипцией для определения мРНК маркеров нейровоспаления (IL-1 β , IBA-1, NF- κ B, TNF- α). Данные представлены как среднее \pm ошибка среднего, дисперсионный анализ с последующим применением post hoc критерия Тьюки.

Оказалось, что в клетках гиппокампа содержание мРНК IBA-1 в группе «12» было выше чем во всех остальных группах: относительно контрольной группы «0» в 3 раза ($p < 0,0001$); группы «1» в 2,5 раза ($p < 0,0001$); группы «3» в 2,5 раза ($p < 0,0001$); группы «9» в 3 раза ($p < 0,0001$); группы «18» в 2,5 раза ($p = 0,0002$); группы «24» в 2 раза ($p = 0,0063$); группы «48» в 3 раза ($p < 0,0001$). Такие же результаты наблюдались при анализе изменения экспрессии IL-1 β . Содержание мРНК этого гена в группе «12» было выше чем во всех остальных группах: относительно контрольной группы «0» в 3,2 раза ($p = 0,0054$); группы «1» в 2,7 раз ($p = 0,0132$); группы «3» в 2,7 раз ($p = 0,0054$); группы «9» в 3,7 раз ($p = 0,003$); группы «24» в 3,6 раз ($p = 0,0021$); группы «48» в 4,9 раз ($p = 0,0011$), кроме группы «18». Уровень мРНК провоспалительного гена NF- κ B не менялся. Увеличение экспрессии мРНК TNF- α наблюдалось на 24 часу после введения относительно группы «0» в 2,6 раз ($p = 0,0373$), относительно группы «1» в 3,4 раза ($p = 0,0061$), относительно группы «12» в 2,2 раз ($p = 0,0491$), и относительно группы «48» в 2,5 раз ($p = 0,0237$). Таким образом, введение дексаметазона в дозе 8 мг/кг приводит к сопряжению процессов снижения уровня эндогенного кортикостерона в крови и повышению продукции провоспалительных агентов в гиппокампе крыс.

1. Третьякова Л.В., Квичанский А.А. Анализ экспрессии мРНК генов, ассоциированных с нейровоспалением, при локальном введении дексаметазона в гиппокамп крысы // Сборник трудов XXIV научной школы-конференции молодых ученых по физиологии и высшей нервной деятельности и нейрофизиологии. 2020. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/analiz-ekspressii-mrnk-genov-assotsiirovannyh-s-neyrovospaleniem-pri-lokalnom-vvedenii-deksametazona-v-gippokamp-krysy> (дата обращения: 14.10.2023).
2. Cain D. W., Cidlowski J. A. Immune regulation by glucocorticoids// Nature reviews Immunology. — 2017. — № 17. — С. 233—247.

Регуляция инициации трансляции через функциональные участки мРНК

Д.С. Виноградова¹, П.С. Касацкий¹, Е.В. Полесскова^{1, 2}, А.Л. Конева^{1, 2, 3}

E-mail: vinogradova_ds@pnpi.nrcki.ru

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

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

³НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

Перевод генетической информации, закодированной в последовательности ДНК в белки происходит на этапе трансляции. На первой стадии инициации в бактериальной системе происходит связывание матричной РНК (мРНК), несущей кодирующую последовательность и инициаторной транспортной РНК (тРНК) с 70S рибосомой с образованием функционально-активного 70S инициаторного комплекса (70S IC). Весь процесс осуществляется тремя инициаторными факторами IF1, IF2, IF3 [1]. Единственным переменным звеном всего процесса трансляции является мРНК, где ее функциональные участки во многом определяют эффективность протекания процесса.

К таким областям, регуляторные функции которых изучались в рамках представленной работы, относятся последовательность Шайна-Дальгарно (ШД) на мРНК, ответственная за связывание с рибосомой, спейсер между последовательностью ШД и инициаторным кодоном, вторичные структуры, располагающиеся в 5'-нетранслируемой области [2]. Был проведен анализ эффективности образования 30S IC, а также 70S IC в зависимости от описанных детерминант. Аффинность лигандов многократно снижалась (до 25 раз) в результате уменьшения длины последовательности ШД или ее отдалении от начала кодирующей области. При этом наличие вторичной структуры со свободной энергией сворачивания 9 ккал/моль, предшествующей последовательности ШД усиливало связывание мРНК, что в свою очередь повышало эффективность образования 30S IC. Скорость связывания мРНК с рибосомой определялась зависимостью вариативности последовательности ШД, где уменьшение длины ее последовательности или отдаление от начала кодирующей области снижали скорость образования 30S IC. Наличие вторичной структуры, описанной выше ускоряло связывание мРНК с рибосомой, а вместе с этим и образование 30S IC.

В результате, несмотря на существование безлидерных мРНК, с отсутствующей 5'-нетранслируемой областью, а также процесса реинициации [3, 4], результаты нашего исследования демонстрируют важную регуляторную функцию последовательности Шайна-Дальгарно на процесс образования 70S IC. Кроме того, вторичные структуры, в зависимости от их положения и свободной энергии сворачивания способны оказывать компенсирующее действие на ингибирование инициации трансляции в результате изменений в последовательности ШД.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 23-74-10088

1. Marina V. Rodnina. Translation in Prokaryotes // Cold Spring Harbor Perspectives in Biology. - Germany. - 2018. - №4
2. Vinogradova D.S., Zegarra V., Maksimova E., Nakamoto J.A., Kasatsky P., Paleskava A., Konevega A.L., Milón P. How the initiating ribosome copes with ppGpp to translate mRNAs // PLoS Biol. – 2020. – vol. 18(1). – e3000593
3. Gualerzi C., Pon C. Initiation of mRNA translation in bacteria: structural and dynamic aspects // Cell. – 2015. – vol. 72. – p. 4341–4367
4. Milón P., Rodnina M. V. Kinetic control of translation initiation in bacteria // Critical Reviews in Biochemistry and Molecular Biology – 2012. – vol. 47. – p. 334–348

Уровень аутофагии и активности ферментов лизосом клеток крови при мультисистемной атрофии

А.С. Журавлев¹, Е.А. Белых¹, В.Н. Пидюрчина¹, Т.С. Усенко^{1,2}, И.В. Милюхина³, О.А. Беркович², Г.В. Байдакова⁴, Е.Ю. Захарова⁴, С.Н. Пчелина^{1,2}, А.К. Емельянов^{1,2}

Email: rigold988@mail.ru

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

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

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

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

Мультисистемная атрофия (МСА) входит в группу нейродегенеративных заболеваний, называемых синуклеинопатиями, которые характеризуются образованием включений, содержащих альфа-синуклеин в селективных популяциях нейронов и клетках глии [1]. Дисфункция лизосом является одним из ключевых этапов в нарушении процесса аутофагии при БП и других синуклеинопатиях [2].

Целью данной работы являлась оценка уровня аутофагии в лимфоцитах периферической крови (ЛПК) и активности лизосомальных ферментов (GCASE, GLA, GAA, GALC, ASM и IDUA), а также концентрации их субстратов в периферической крови у пациентов с МСА и индивидуумов контрольной группы.

Для достижения поставленной цели у группы пациентов с МСА (N=11, 63,9±9,4, 7 мужчин) и здоровых индивидуумов контрольной группы (N=13, 64,6±5,5, 6 мужчин), собранных в сотрудничестве с Институтом Мозга Человека им. Н.П. Бехтеревой Российской Академии Наук и Первым Санкт-Петербургским государственным медицинским университетом им. акад. И.П. Павлова, из 8 мл периферической крови были выделены лимфоциты путём центрифугирования в градиенте плотности раствора фиколла (Ficoll-Paque PLUS, GE Healthcare). Оценка уровня аутофагии проводилась методом вестерн-блоттинга посредством оценки относительного количества белка. Количество исследуемого белка было нормировано на соответствующие показатели для референсного белка GAPDH. Оценка активности лизосомных ферментов и концентрации их субстратов в периферической крови была осуществлена методом ВЭЖХ/МС/МС в сотрудничестве с Медико-генетическим научным центром им. Н.П. Бочкова, Москва.

Было обнаружено статистически значимое повышение уровня LC3II и LC3I в ЛПК у пациентов с МСА по сравнению с контролем (0,313 (0,086÷0,545) и 0,131(0,029÷0,229), p<0,013; 1,160 (0,554÷1,830) и 0,908 (0,498÷1,161), p<0,008, соответственно). Также, выявлено снижение концентрации лизосфингомиелина (LysoSM) в крови у пациентов с МСА по сравнению с контролем (4,06 (2,20÷9,83) и 12,78 (3,44÷15,98), p<0,009). Была обнаружена обратная (p<0,05) корреляция между относительным уровнем LC3II ЛПК, активностью IDUA и концентрацией LysoSM в крови лиц исследуемых групп.

Таким образом, из полученных данных можно предположить, что развитие МСА сопровождается нарушением процесса аутофагии в ЛПК и снижением концентрации лизосфингомиелина периферической крови.

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

1. Fanciulli A, Stankovic I, Krismer F, Seppi K, Levin J, Wenning GK. Multiple system atrophy // Int Rev Neurobiol. 2019. N. 149. P. 137-192.
2. Cerri S, Blandini F. Role of Autophagy in Parkinson's Disease. // Curr Med Chem. 2019. V. 26 N. 20. P. 3702-3718.

Лизофосфолипаза PNPLA6/sws *Drosophila melanogaster* влияет на баланс липидов и барьерную функцию энтероцитов кишечника

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

E-mail: anna.zolotnikova2002@mail.ru

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

Продуктом гена sws является фосфолипаза В, которая расщепляет фосфолипиды по сайтам А1 и А2. Ее субстратом являются фосфатидилхолин и лизофосфатидилхолин. Известно, что нокадаун гена sws приводит к уменьшению эстеразной активности в клетках и увеличению фосфатидилхолина [1]. И, наоборот, при гиперэкспрессии гена sws активность эстеразы повышается и количество фосфатидилхолина у соответствующей линии мух снижается по сравнению с линией дикого типа. Ранее было показано, что дисфункция данного гена вызывает развитие нейродегенерации в мозге имаго [2], однако стало известно, что он также экспрессируется и в пищеварительной системе. Главным ее органом является кишечник, который состоит из переднего, среднего, заднего отдела и сообщается с мальпигиевыми сосудами [3]. Внутренняя сторона кишечника выстлана энтероцитами, которые выполняют всасывающую функцию, но также способны запасать питательные вещества, в частности, в виде липидных капель. Дисфункция гена sws приводит к потере его основной эстеразной функции, вследствие которых продукт экспрессии данного гена изменяет баланс липидов в клетке. Поэтому можно наблюдать различия в количестве и размере липидных капель в энтероцитах у линии дикого типа Canton-S и мутантной линии sws1.

С помощью бинарной дрожжевой системы GAL4/UAS удалось определить тип клеток кишечника, в которых экспрессируется ген sws. Для этого в работе были использованы мухи с генотипом sws-GAL4;UAS-CD8-RFP, с помощью которых визуально был выявлен тип клеток, где активен промотор гена sws. Также было проанализировано состояние септированных контактов и количество липидных капель в среднем кишечнике у линии с мутацией sws1 по сравнению с линией дикого типа Canton-S.

1. Kmoch S. et al. Mutations in PNPLA6 are linked to photoreceptor and various forms of childhood blindness / Nature Communications. 2015. V. 6.
2. Kretschmar D. et al. The *swiss cheese mutant* causes glial hyperwrapping and brain degeneration in *Drosophila* / The journal of neuroscience. 1997. № 19 (17). P. 7425-7432.
3. Irene Miguel-Aliaga et al. Anatomy and Physiology of the Digestive Tract of *Drosophila melanogaster*. – Genetics. – V. 210. Issue 2. 2018. – P. 357–396.

Роль 5'-нетранслируемой области мРНК в элонгации трансляции

Д.С. Виноградова¹, П.С. Касацкий¹, Ж.Ю. Сидорова¹, Е.В. Полесскова^{1,2}, А.Л. Коневага^{1,2,3}

E-mail: vinogradova_ds@pnpi.nrcki.ru

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

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

³НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

Трансляция – один из фундаментальных процессов жизнедеятельности клетки, отвечающий за синтез новых белков. Этапы трансляции подразделяют на инициацию, элонгацию и терминацию. В процессе синтеза белка в бактериальной клетке происходит формирование активного 70S рибосомного комплекса, где происходит считывание генетической информации с матричной РНК (мРНК) и превращение ее в аминокислотную последовательность белка при помощи рибосомы. На стадии элонгации происходит наращивание полипептидной цепи при соответствующем декодировании кодонов мРНК [1]. Связывание мРНК с установлением правильной рамки считывания происходит на первом этапе трансляции – инициации, где функциональные детерминанты в 5'-нетранслируемой области (5'-НТО) мРНК играют важную роль [2]. Однако, и после сборки инициаторного комплекса данные участки оказывают регуляторное действие на последующую стадию элонгации.

В представленных результатах исследования анализировалось влияние изменений в 5'-НТО мРНК на стадию элонгации, а именно на эффективность встраивания элонгационной тРНК, несущей соответствующую аминокислоту для наращивания полипептидной цепи, эффективность образования пептидной связи. Так мы показали влияние изменений в последовательности Шайна-Дальгарно (ШД) на эффективность этапа элонгации. Уменьшение длины последовательности ШД или ее отдаление от инициаторного кодона оказывают ингибирующее действие на образование пептидной связи, не оказывая серьезного влияния на скорость связывания элонгационной тРНК с рибосомой. При этом возникновение вторичной структуры в области мРНК, предшествующей последовательности ШД стимулирует синтез первой пептидной связи.

Таким образом, 5'-НТО мРНК, являющаяся некодирующей последовательностью оказывает регуляторную функцию не только на этапе связывания мРНК с рибосомой при формировании инициаторного комплекса, но и на последующем этапе элонгации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-74-10088

1. Marina V. Rodnina. Translation in Prokaryotes // Cold Spring Harbor Perspectives in Biology. - Germany. - 2018. - №4
2. Vinogradova D.S., Zegarra V., Maksimova E., Nakamoto J.A., Kasatsky P., Paleskava A., Konevega A.L., Milón P. How the initiating ribosome copes with ppGpp to translate mRNAs // PLoS Biol. – 2020. – vol. 18(1). – e3000593

Поиск мутаций, ассоциированных со спинальной мышечной атрофией в гене *BICD2*

И.В. Ткачева^{1,2}, *А.Е. Комиссаров*², *С.В. Саранцева*²

E-mail: iritka4eva@gmail.com

¹Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

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

Спинально-мышечная атрофия (СМА) - это группа генетических нарушений, которые влияют на функцию нервных клеток, ответственных за контроль мышц. Это приводит к прогрессирующей слабости и атрофии скелетных мышц. СМА обычно начинается в раннем детском возрасте и в зависимости от типа может проявляться в различной степени тяжести. Некоторые общие признаки включают слабость мышц, особенно в ногах и руках, трудности с движением и контролем тела, проблемы с дыханием и прогрессирующую потерю мышечной массы [1].

СМА обусловлена мутацией в гене *SMN1* (Survival Motor Neuron 1), который отвечает за производство белка, необходимого для выживания и поддержки нервных клеток, контролирующих мышцы. Это ведет к дегенерации этих клеток и потере связи между ними и мышцами. Генетическая часть заболевания еще не до конца изучена, и появляется все больше работ, которые показывают, что причиной развития СМА могут быть мутации в других генах.

Одним из таких генов является ген *BICD2* (Bicaudal D Homolog 2) ответственен за опосредованную динеином подвижность микротрубочек. Все больше исследований подтверждают, что мутация в этом гене может быть причиной развития этого заболевания. СМА, ассоциированная с этим геном, является аутосомно-доминантной формой и чаще всего проявляется началом ранней детской мышечной слабости и атрофии нижних конечностей. [2]

Целью данной работы являлся поиск мутаций в гене *BICD2* у пациентов со спинальной мышечной атрофией.

В данной работе проводился анализ баз данных для поиска участков гена *BICD2*, которые наиболее часто подвержены мутагенезу, затем подбирались соответствующие праймеры на данные участки и затем секвенировали по Сенгеру. В результате которого нам удалось найти гетерозиготную мутацию в гене *BICD2* (rs1587667544). Данная мутация приводит к замене Arg на Cys в позиции 747 соответствующего белка, что является причиной развития спинальной мышечной атрофии [3].

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

1. Farrar MA, Kiernan MC. The Genetics of Spinal Muscular Atrophy: Progress and Challenges // Neurotherapeutics. 2015 Apr; №12(2) P. 290-302.
2. Koboldt DC, Waldrop MA, Wilson RK, Flanigan KM. The Genotypic and Phenotypic Spectrum of *BICD2* Variants in Spinal Muscular Atrophy // Annals of neurology. 2020 Apr; № 87(4) P. 487-496.
3. Synofzik M, Martinez-Carrera LA, Lindig T, et al. Dominant spinal muscular atrophy due to *BICD2*: a novel mutation refines the phenotype // Journal of Neurology, Neurosurgery & Psychiatry. 2014; № 85 P. 590-592.

Активность чекпойнта связана с правильной сборкой хроматина

***Е.А. Алексеева*^{1,2}, *И.И. Скобелева*¹, *Т.А. Евстюхина*^{1,2}, *И.В. Бахланова*¹, *Д.В. Федоров*¹,
В.Т. Пешехонов^{1,2}, *В.Г. Королев*^{1,2}**

E-mail: alekseeva_ea@npri.nrcki.ru

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

² *Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

Ацетилирование и деацетилирование гистонов играет большую роль в репаративной сборке хроматина. Процесс сборки хроматина осуществляется поэтапно при помощи гистоновых шаперонов Asf1, CAF-1, NuB4 и RPD3. Комплекс NuB4 (состоит из субъединиц Hat1, Hat2, Hif1 и Hsm3) — это гистонацетилазный комплекс, который ацетилюет вновь образовавшиеся гистоны H3 и H4, тем самым помогая их переносу с помощью шаперона Asf1 в ядро к отрепарированной ДНК [1,2]. Комплекс RPD3 (состоит из Rpd3, Sin3 и Ume1) представляет собой гистондеацетилазу, и снимает паттерн ацетилирования с гистонов, тем самым помогая правильной сборке хроматина и обеспечивая стабильность нуклеосом [3]. Чекпойнтная киназа Rad53, находится в комплексе с гистоновым шапероном Asf1 и высвобождается в ответ на повреждение ДНК [4]. Наши исследования показали, что инактивация субъединиц Hsm3p, Hif1p и Rpd3p, Sin3p комплексов NuB4 и RPD3, соответственно, приводит к подавлению активности чекпойнтной киназы Rad53. Мутации *hsm3Δ*, *hif1Δ* и *rpd3Δ* приводят к увеличению частоты УФ-индуцированного мутагенеза по сравнению со штаммом дикого типа. Для мутации *sin3Δ* было показано снижение частоты УФ-индуцированного мутагенеза по сравнению со штаммом дикого типа

Полученные данные показывают, что неправильная сборка хроматина в процессе репарации ДНК, может привести к нарушению активности чекпойнта.

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

1. Gaillard P.H, Martini E.M, Kaufman P.D., et al. Chromatin assembly coupled to DNA repair: a new role for chromatin assembly factor 1 // Cell. 2012. V. 86. № 6. P. 887-96.
2. Evstyukhina T.A., Alekseeva E.A., Fedorov D.V., et al. Genetic analysis of the Hsm3 protein function in yeast *Saccharomyces cerevisiae* NuB4 complex. Genes. 2021. № 12. P. 1083.
3. Chen X-F., Kuryan B., Kitada T., et al. The Rpd3 core complex is a chromatin stabilization module. Curr Biol. 2012. V. 22. № 1. P. 56-63.
4. Hu F., Alcasabas A.A., Elledge S.J. Asf1 links Rad53 to control of chromatin assembly. Genes Dev. 2001. V. 15. № 9. P. 1061–1066.

Ассоциация экзонного варианта rs823144 гена *RAB7L1* с активностью лизосомных гидролаз в крови при болезни Паркинсона

К.С. Башарова¹, А.И. Безрукова^{1,2}, Байдакова Г.В.^{1,3}, Е.А. Ткаченко¹, Д.В. Ваганова¹, Миллюхина И.В.^{1,4}, Захарова Е.Ю.³, Пчелина С.Н.^{1,2}, Усенко Т.С.^{1,2}

E-mail: basharova_ks@npri.nrcki.ru

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

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

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

⁴Институт мозга человека РАН, Санкт-Петербург, Россия

Последние данные указывают, что варианты гена *RAB7L1*, кодирующего белок Rab29, ассоциированы с риском распространенного нейродегенеративного заболевания, болезни Паркинсона (БП) [1]. Белок Rab29, является одним из регуляторов фермента богатой лейциновыми повторами киназы 2 (LRRK2), который в свою очередь вовлечен в везикулярный транспорт лизосомных гидролаз от эндоплазматического ретикулума через аппарат Гольджи в лизосому [2]. Мы предполагаем, что изменение работы гена *RAB7L1* посредством экзонных вариантов может влиять на работу белка Rab29, что в свою очередь может быть ассоциировано с изменением активности лизосомных гидролаз.

Цель данного исследования заключалась в оценке влияния варианта rs823144 гена *RAB7L1* на риск и возраст начала БП, а также на активность лизосомных гидролаз и концентрации сфинголипидов в крови пациентов с БП и контроля.

Скрининг экзонного варианта rs823144 гена *RAB7L1* проводился в группе пациентов с БП (N=397) и в контроле (N=372) разработанным нами методом ПЦР с последующим рестрикционным анализом. Активности лизосомных гидролаз (глюкоцереброзидаза (GCase), альфа-галактозидаза (GLA), кислая сфингомиелиназа (ASMase), галактозилцереброзидазы (GALC)) и концентрации сфинголипидов (глоботриаозилсфингозин (LysoGb3), сфингомиелин (LysoSM), гексозилсфингозин (HexSph)) оценивались в крови методом высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией (ВЭЖХ-МС/МС).

Частоты генотипов rs823144 гена *RAB7L1* среди пациентов с БП и контроля составили, соответственно: AA – 61.71% и 57.53%, AC – 34.01% и 36.83%, CC – 4.28% и 5.65%. Ассоциации варианта rs823144 гена *RAB7L1* с риском БП выявлено не было. Однако, пациенты с БП, являющиеся носителями генотипов AC и CC, характеризовались снижением возраста начала заболевания на 3.5 и 8 лет, соответственно (HR=1.30, 95%CI:1.03-1.65, p=0.02; HR=1.83, 95%CI:1.04-3.2, p=0.04). Носители аллеля C rs823144 гена *RAB7L1* в группе пациентов с БП характеризовались повышением активности фермента GLA (p=0.038), а также снижением концентрации LysoGb3 (p=0.022) в крови, что было подтверждено регрессионным анализом (β =-0.24, p=0.009). Также была показана ассоциация между увеличением активности GCase в крови и носительством аллеля C в группе контроля (β =1.8, p=0.045).

Нами впервые были оценены частоты генотипов варианта rs823144 гена *RAB7L1* в Северо-Западном регионе России у пациентов с БП и контроля и показана ассоциация аллеля C rs823144 гена *RAB7L1* с возрастом начала БП, а также активностью лизосомных гидролаз и концентрацией их субстратов в крови пациентов с БП и контроля.

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

1. Nalls MA. et al. Identification of novel risk loci, causal insights, and heritable risk for Parkinson's disease: a meta-analysis of genome-wide association studies // *Lancet Neurol.* 2019. V. 18. No. 12. P. 1091.
2. Beilina A. et al. Unbiased screen for interactors of leucine-rich repeat kinase 2 supports a common pathway for sporadic and familial Parkinson disease // *PNAS USA.* 2014. V. 111. No. 7. P. 2626.

Реализация поиска радиуса инерции на основе программного пакета GROMACS

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

E-mail: basov492@mail.ru

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

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

Молекулярная динамика (МД) – это техника компьютерного моделирования, позволяющая проследить эволюцию системы взаимодействующих атомов во времени с помощью интегрирования уравнений движения. Несомненным преимуществом метода МД является возможность моделирования системы при заданной температуре и заданном давлении. Одним из вариантов анализа полученных траекторий МД является определение радиуса инерции [1], который в свою очередь позволяет оценить геометрическую характеристику биологических структур, таких как молекулы ДНК, РНК и белки.

Разработанный программный код предоставляет возможность вычислить радиус инерции для различных биологических структур, основываясь на атомных координатах, зарядах, массах и вероятностях их составляющих элементов.

На протяжении более чем 30 лет, активно используется алгоритм для расчёта радиуса инерции, у него есть недостатки, в число которых входит время работы и ограничения. Разработанный код обделен этими недостатками. Была проверена эффективность программного кода с помощью различных биологических структур. Полученные результаты были сравнены с ранее опубликованными данными. Результаты показывают высокую точность и согласованность с предыдущими исследованиями. Программа была проверенная и одобрена разработчиками программного обеспечения GROMACS [2], и войдет в следующий релиз в 2024 году. Предоставление открытого доступа к программному коду позволит другим исследователям использовать его для своих исследований по структурной биоинформатике.

1. GROMACS MANUAL [Электронный ресурс]: руководство к программному пакету GROMACS. [Режим доступа] – URL: <https://manual.gromacs.org/> - 2019.
2. GROMACS [Электронный ресурс]: бесплатный пакет программного обеспечения с открытым исходным кодом для высокопроизводительной молекулярной динамики и анализа результатов. [Режим доступа.] – URL: <https://www.gromacs.org/> - 2023.

Изучение структуры сывороточного альбумина человека в растворах, содержащих двухвалентные ионы металлов***Е.В. Федотова, С.В. Пастон, А.Д. Горюх***

E-mail: st077318@student.spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время очень актуальной становится проблема профилактики и лечения нейродегенеративных заболеваний, вызванных конформационными изменениями в структуре глобулярных белков, приводящих к образованию амилоидных фибрилл. Из-за высокого сродства глобулярных белков к ионам металлов возможно образование межмолекулярных бета-слоев, что провоцирует развитие амилоидоза [1]. В данной работе исследовано взаимодействие модельного глобулярного белка сывороточного альбумина человека (САЧ) с ионами Mg^{2+} , Mn^{2+} , Co^{2+} и Cu^{2+} в растворе и конформационные изменения белка, вызванные этим взаимодействием. Для исследования вторичной структуры белка использован метод ИК Фурье спектроскопии на приставке НПВО с деконволюцией полосы Амид I [2]. Третичную структуру САЧ изучали по спектрам поглощения и собственной флуоресценции белка [3], для характеристики поверхностного заряда белковых частиц применялся метод дзета-потенциала.

Спектры поглощения и флуоресценции ароматических аминокислот белка, измеренные в растворах, содержащих ионы Co^{2+} , Mg^{2+} , Mn^{2+} , не претерпели существенных изменений, что указывает на отсутствие нарушений в третичной структуре белка и признаков агрегации. Присутствие ионов меди в растворе альбумина, напротив, сильно влияет на спектры поглощения и флуоресценции. Уже при соотношении $[Cu^{2+}]:[САЧ]=1:1$ наблюдается частично обратимая агрегация белка в растворе. Это приводит к заметному возрастанию оптической плотности D вдали от полосы поглощения белка. При таком же соотношении наблюдается резкий рост D в полосе поглощения белка и падение интенсивности флуоресценции. При $[Cu^{2+}]:[САЧ]>1$ наблюдается незначительное падение D и рост интенсивности флуоресценции. Наблюдаемые изменения свидетельствуют о сильном кооперативном связывании САЧ с медью.

При увеличении содержания ионов металлов в растворах САЧ с Co^{2+} и Mn^{2+} наблюдается тенденция к росту количества бета-слоев и снижению количества альфа-спиральных участков в структуре белка. Ионы магния не оказывают заметного влияния на вторичную структуру САЧ. В присутствии ионов меди при соотношении $[САЧ]:[Cu^{2+}] > 1$ происходит резкое нарушение вторичной структуры белка: содержание альфа-спиралей снижается, а бета-листов возрастает как в растворе, так и в агрегированной фракции.

При измерении дзета-потенциала молекул САЧ отчетливо проявляется связывание белка с катионами, в результате чего отрицательный дзета-потенциал белка уменьшается по модулю. Заряд альбумина резко растет, приближаясь к нулю, при соотношении концентраций $[Mg^{2+}]:[САЧ] = 1000$ или $[Co^{2+}]:[САЧ] = 100$. Взаимодействие САЧ с Cu^{2+} приводит к изменению знака заряда белка. Дзета-потенциал равный нулю достигается при соотношении 1:1. Перезарядка молекул альбумина свидетельствует об образовании прочного комплекса с катионами меди.

Часть исследований проведена с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ "Оптические и лазерные методы исследования вещества".

1. Jacob-Roetne R., Jacobsen H. Alzheimer's disease: from pathology to therapeutic approaches // *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. V. 48. P. 3030-3059.
2. Kong J., Yu S. Fourier Transform Infrared Spectroscopic Analysis of Protein Secondary Structures // *Acta Biochimica et Biophysica Sinica*. 2007. V. 39. P. 549-559.
3. Cantor C. R., Shimmel P. R. *Biophysical Chemistry*. Part 2. San Francisco: W. H. Freeman and Company. 1980. P. 496.

УДК: 577.16.08; 620.186; 57.08; 57.085.23

Методы анализа изображений, полученных с конфокального микроскопа, с использованием трекинга клеток с флуоресцентным красителем

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

E-mail: gorelov_sv@npi.nrcki.ru

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

Конфокальная микроскопия является важным инструментом для исследования биологических объектов на микроуровне. Этот метод позволяет получить высококачественные изображения, которые могут быть использованы для анализа структуры и функций клеток, тканей и органов.

Одним из главных преимуществ конфокальной микроскопии является то, что она позволяет получать изображения с высоким разрешением и адаптивной глубиной проникновения. Это достигается благодаря использованию лазера, который позволяет получить изображения только из определённых слоёв образца. Это позволяет исследователям получать более точные данные о структуре объектов и их функциях.

Анализ изображений конфокальной микроскопии позволяет исследователям выявлять различные характеристики объектов, такие как размеры, формы, расположение и динамика. В данной работе исследовались характеристики нейтрофилов периферической крови человека, окрашенных флуоресцентным красителем hoechst 33342 [1], встраивающимся в ДНК по малой бороздке.

Для решения этой задачи были разработаны методы анализа изображений на основе клеточного трекинга, которые позволяют определить подвижность и скорость нейтрофилов. Была написана программа на языке Python, которая, используя библиотеку OpenCV [2], выделяет окрашенные клетки, происходит анализ таких параметров, как скорость и подвижность на подложке, определяющихся как изменения во времени центра масс выделенных контуров и изменения во времени геометрического расположения в двухмерном пространстве занимаемой площадью выделенного контура, и получает их распределения.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме "Функциональная и структурная организация сложных, мультикомпонентных биологических систем и их динамика" (регистрационный номер № 121060200127-6)

1. D.L. Garner, "Hoechst 33342: The dye that enabled differentiation of living X-and Y-chromosome bearing mammalian sperm", *Theriogenology* 2009, 11-21; <https://doi.org/10.1016/j.theriogenology.2008.09.023>.
2. Bradski, G., 2000. The OpenCV Library. Dr. Dobb's Journal of Software Tools.

Изучение повреждений ДНК под действием ионизирующих излучений

Д.Н. Иванова¹, О.М. Котб^{1,2}, Д.С. Брожек³, В.Н. Вербенко³, Е.П. Гулевич³, В.Ф. Ежов^{1,3}, Д.Л. Карлин³, И.Ф. Мурзакова¹, Ф.А. Пак³, С.В. Пастон¹, Э.В. Фомин³, А.И. Халиков³

E-mail: st076983@student.spbu.ru

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

²Университет Загазиг, Кафедра физики, Факультет естественных наук, Загазиг, Египет

³ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

В результате прямой ионизации самой молекулы ДНК и её атаки активными продуктами радиолитического происхождения происходит химическая модификация макромолекулы. К наиболее вероятным радиационным повреждениям ДНК относятся разрушение и отрыв азотистых оснований (а.о.), одно- и двунитевые разрывы, нарушения вторичной структуры [1]. В настоящей работе изучаются изменения в структуре ДНК под действием различных ионизирующих излучений: протонов с энергией 1 ГэВ, гамма-излучения ^{60}Co с энергией квантов 1,17 МэВ и 1,33 МэВ и мягкого рентгеновского излучения со средней энергией квантов 60кэВ.

Для определения радиационно-химического выхода разрушения а.о. (G) был применён метод Спирина определения концентрации хромофоров после полного разрушения вторичной структуры ДНК путём гидролиза [2]. Нарушения первичной и вторичной структуры ДНК исследовали методом спектрофотометрического плавления ДНК. Полученные зависимости $D_{260}=f(T)$ и $dD_{260}/dT=\varphi(T)$ представляют собой кривые плавления ДНК, их форма существенно зависит от состояния первичной и вторичной структуры ДНК в исходном растворе [3].

В работе были исследованы растворы ДНК с концентрацией низкомолекулярного электролита 5мМ и 0,15М NaCl. Во всех исследованных растворах облучение вызывает снижение температуры плавления, что является следствием дестабилизации вторичной структуры ДНК. В растворах 0,15М NaCl температура плавления T_m необлученной и облученной ДНК существенно выше, чем в растворах 5мМ NaCl – как и ожидалось, мы наблюдаем эффект стабилизации вторичной структуры ДНК из-за экранировки фосфатных групп ионами Na^+ . Показано, что наименьшее влияние на T_m ДНК оказывает мягкое рентгеновское излучение, наибольшее повреждающее действие оказывают высокоэнергетичные γ -кванты, протонное излучение по эффективности занимает промежуточное положение. Однако, наибольшее разрушение а.о. ДНК достигается при протонном облучении, а эффективность гамма- и рентгеновского излучения по этому параметру совпадают в пределах погрешности. Эксперимент показал, что при рентгеновском облучении основной вклад в повреждения ДНК вносит косвенное действие радиации. Концентрация ДНК в облучаемом растворе влияет на количество повреждений: с уменьшением концентрации ДНК радиационно-химический выход а.о. снижается.

Часть исследований проведена с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники» и «Оптические и лазерные методы исследования вещества».

1. Кудряшов Ю.Б. Радиационная биофизика (ионизирующие излучения). М.: Физматлит, 2004. 442 с.
2. Tankovskaia S.A., Kotb O.M., Dommes O.A., Paston S. V. Application of spectral methods for studying DNA damage induced by gamma-radiation // Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc. 2018. V. 200. P. 85–92.
3. Веденов А.А., Дыхне А.М., Франк-Каменецкий М.Д. Переход спираль-клубок в ДНК // УФН. 1971. Т.105, вып.3. С. 479–519.

Оценка влияния альтернативных механизмов ответа клетки на повреждение ДНК на мутагенную активность цитозиндезаминаз семейства AID/APOBEC

Е.В. Кравцова^{1,2}, Е.И. Степченкова^{2,3}

E-mail: elizavetakravtsova830@mail.ru

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

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

³Санкт-Петербургский филиал Института общей генетики им. Н. И. Вавилова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Цитозиндезаминазы семейства AID/APOBEC – ферменты, способные вносить мутагенные повреждения в ДНК и РНК путем дезаминирования цитозина до урацила. Физиологическая роль реакции дезаминирования цитозина в составе нуклеиновых кислот заключается в обеспечении врождённого и специфического иммунитета у позвоночных, включая человека. Накопление мутаций в геномах ретровирусов и мобильных элементов в результате активности цитозиндезаминаз APOBEC3 предотвращает распространение чужеродной ДНК в клетке хозяина. Зависимая от активности AID индукция точечных мутаций и рекомбинации в генах иммуноглобулинов повышает аффинность антител [1]. Нарушенная регуляция активности цитозиндезаминаз приводит к накоплению нежелательных кластерных мутаций в геноме клеток человека, что способствует развитию онкологических заболеваний [2]. Это определяет актуальность исследования факторов, влияющих на мутагенную активность цитозиндезаминаз.

На мутагенную активность цитозиндезаминаз влияет множество факторов. Одним из важнейших среди них является эффективность систем временной устойчивости к повреждениям ДНК. Выделяют два альтернативных механизма ответа на повреждения генетического материала: безошибочная гомологичная рекомбинация (HR) и синтез в обход повреждения (TLS), подверженный ошибкам.

Целью работы является исследование влияния двух альтернативных ветвей ответа клетки на повреждения ДНК на частоту мутагенеза, вызванную цитозиндезаминазами. Для этого мы получили штаммы дрожжей *S. cerevisiae*, несущие делеции и инсерции генов *REV1* и *REV3*, кодирующих каталитические субъединицы TLS-ДНК-полимераз, и штаммы с делецией гена *RAD52*, кодирующего одноименный белок, способствующий отжигу комплементарной одноцепочечной ДНК для последующей гомологичной рекомбинации. Полученные штаммы трансформировали плазмидами, несущими гены цитозиндезаминаз человека (*APOBEC3A*) и морской миноги (*PmCDA1*). Частоту возникновения мутаций определяли по отношению числа мутантных клеток, устойчивых к L-канаванину, к общему числу живых клеток.

Мы показали, что инактивация или сверхэкспрессия генов *REV1* и *REV3* не влияет на частоту мутаций, индуцированных цитозиндезаминазами, при этом на фоне делеции гена *RAD52* частота мутагенеза увеличивается синергически и на 2 порядка превышает частоту мутагенеза по сравнению со штаммом дикого типа. Из-за высокой токсичности факторы, повышающие в опухолевых клетках частоту мутагенеза, индуцированную цитозиндезаминазами, могут быть рекомендованы для разработки стратегий лечения рака.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20–15–00081

1. Petersen-Mahrt S. DNA deamination in immunity // Immunological Reviews. 2005. V. 203. No. 1. P. 80–97.
2. Alexandrov L.B. et al. The repertoire of mutational signatures in human cancer // Nature. 2020. V. 578. No. 7793. P. 94–101.

Марганец-индуцированное нарушение метаболизма моноаминов

В. М. Кудринская, И.Р. Назаров, Д.А. Обухова, И. С. Ивлева

E-mail: v.kudrinskaja2011@yandex.ru

ФГБНУ Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

Марганец (Mn) является эссенциальным элементом, необходимым для нормального функционирования организма [1]. Однако поступление Mn в организм в концентрациях, превышающих допустимые уровни, приводит к развитию марганцевой энцефалопатии, которая имеет фенотипические особенности, аналогичные идиопатической болезни Паркинсона. Одним из механизмов токсического действия Mn является Mn-опосредованное изменение в синтезе нейромедиаторов [2]. В связи с этим, целью данной работы было: оценить влияние избыточного поступления Mn на метаболизм моноаминов у крыс.

Работа выполнена на взрослых самцах крыс Вистар, 220–250 г. Животные были разделены на две группы: первой группе интраназально вводили раствор $MnCl_2$ (1 мг/жив в объеме 20 мкл в день), а второй группе – 20 мкл физиологического раствора в течение 30 дней. Концентрацию моноаминов и их метаболитов измеряли с помощью метода ВЭЖХ с электрохимической детекцией в клетках стриатума лабораторных животных.

Было показано, что хроническое введение $MnCl_2$ лабораторным животным приводит к снижению уровня дофамина в 1,5 раза, 3,4-диоксифенилуксусной кислоты в 1,5 раза и гомованилиновой кислоты в 1,4 раза по сравнению с контролем в клетках стриатума и не оказывает влияния на уровень норадреналина и серотонина.

Изменение концентрации моноаминов может быть связано с нарушением активности ферментов, принимающих участие в их метаболизме, например, тирозингидроксилаза – фермент, участвующий в синтезе дофамина и норадреналина, триптофангидроксилаза-2 – фермент, участвующий в синтезе серотонина, и моноаминоксидаза-А – фермент, участвующий в метаболизме норадреналина и серотонина. Нами были измерены уровни мРНК основных ферментов метаболизма нейромедиаторов в клетках стриатума крыс. Оказалось, что хроническое воздействие $MnCl_2$ на лабораторных животных приводит к уменьшению уровней мРНК тирозингидроксилазы в 1,6 раза, триптофангидроксилазы-2 в 2,2 раза и моноаминоксидазы-А в 2,3 раза в клетках стриатума по сравнению с контрольной группой.

Исходя из полученных данных можно заключить, что хроническое интраназальное введение $MnCl_2$ приводит к нарушению метаболизма дофамина, в том числе за счет подавления его синтеза.

1. Martins A. C. et al. Manganese in the diet: bioaccessibility, adequate intake, and neurotoxicological effects //Journal of agricultural and food chemistry. – 2020. – Т. 68. – №. 46. – С. 12893-12903.
2. Balachandran R. C. et al. Brain manganese and the balance between essential roles and neurotoxicity //Journal of Biological Chemistry. – 2020. – Т. 295. – №. 19. – С. 6312-6329.

Выпрямление ионного тока в нанопипетках: эксперимент и моделирование

*С.Ю. Лукашенко¹, О.М. Горбенко¹, М.В. Жуков¹, С.В. Пичахчи¹, И.Д. Сапожников¹,
М.Л. Фельштын¹, А.О. Голубок¹*

E-mail: lukashenko13@mail.ru

¹*Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Стеклянные микропипетки являются одним из основных инструментов электрофизиологии. В частности, с их помощью исследуются ионные каналы в клеточных мембранах [1]. По мере использования микропипеток уменьшался размер их апертуры, и оказалось, что ионный ток через наноапертуру (~100 nm) сильно зависит от величины и знака приложенного напряжения [2]. В некотором смысле нанопипетки сами ведут себя подобно исследуемым с их помощью ионным каналам.

Ионная проводимость нанопипеток активно исследуется как экспериментально, так и с помощью численного моделирования. Для этого решается система из уравнений Пуассона-Больцмана, Нернста-Планка, Навье-Стокса [3]. При этом вводится коэффициент ректификации, как отношение токов при положительном и отрицательном напряжении, на примере которого демонстрируется хорошее совпадение теории и эксперимента, однако абсолютные значения измеренных ионных токов плохо согласуются с расчетными значениями.

Цель нашей работы – выявление и учет факторов, влияющих на это расхождение.

Вообще говоря, при описании кинетики ионного тока нужно учитывать скорость химических реакций, протекающих на электродах, в результате которых ионный ток преобразуется в электронный. Кроме того, следует учитывать повышение вязкости воды в наноканалах [4] и, как следствие, уменьшение коэффициента диффузии по сравнению с табличным объемным коэффициентом.

Известно, что учёт электрохимической реакции на электродах в строгом виде является сложной задачей. В нашей работе, мы учли реакцию на электроде эмпирическим образом. Для этого мы экспериментально измерили вольтамперную характеристику капилляров с макроапертурой 690 мкм и сравнили её с модельными расчётами, в которых использовали табличное значение для коэффициента диффузии. Таким образом, мы определили поправочный коэффициент в выражении для ионного тока, обусловленный скоростью реакции на электродах. Затем мы ввели этот поправочный коэффициент в расчет ионного тока через нанокapилляр и учли отличие вязкости в наноканале от объёмной вязкости. В результате, это дало лучшее согласие экспериментально измеренной вольт-амперной характеристики с модельным расчетом. Таким образом, предложенный подход дает адекватную модель выпрямления ионного тока, протекающего через нанопипетку. Очевидно, что знание адекватной модели необходимо для правильной интерпретации измерений, выполняемых с помощью нанопипеток.

1. Neher E. et al. Improved Patch-Clamp Techniques for High-Resolution Current Recording from Cells and Cell-Free Membrane Patches. // Pfluegers Archive. 1981. V. 391. P. 85-100.
2. Wei C. et al. Current Rectification at Quartz Nanopipet Electrodes // Analytical Chemistry. 1997. V. 69. P. 4627–4633.
3. Rabinowitz J. Nanoscale Fluid Vortices and Nonlinear Electroosmotic Flow Drive Ion Current Rectification in the Presence of Concentration Gradients // Physical Chemistry A. 2019. V. 123. No. 38. P. 8285–82933.
4. Sara Á-Q. et al. Water viscosity in confined nanoporous media and flow through nanofiltration membranes Microporous and Mesoporous Materials 2020. V. 303. 110289.

Разработка и оптимизация состава липосомальной формы эфиров природного антиоксиданта астаксантина, модифицированной плуроником F68, и изучение антиоксидантной активности полученных липосом

Н.С. Марченкова^{1,2}, Е.А. Куликов³, Н.Ю. Лотош³, А.А. Селищева^{2,3}

E-mail: marchenkova.nata@inbox.ru

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

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

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

Астаксантин – это природный кетокаротиноид красно-оранжевого цвета, основным источником которого является микроводоросль *Haematococcus pluvialis*, а также способный к накоплению в клетках некоторых морских организмов и птиц. Данный каротиноид существует в природе в незамещённой и этерифицированной форме и по многим показателям считается сильнейшим антиоксидантом среди всех каротиноидов [1], причём эфиры астаксантина (эфАст) в опытах *in vitro* демонстрируют лучший эффект, чем его незамещённая форма [2]. За последние десятилетия астаксантин стал популярен благодаря широкому спектру своей биологической активности: предотвращение окислительного стресса, профилактика сердечно-сосудистых и нейродегенеративных заболеваний, противовоспалительное действие и др. Однако в связи с малой растворимостью в воде, низкой биодоступностью и недостаточной стабильностью к воздействию внешних факторов (свет, температура и др.) использование этого веществ сильно ограничено.

Целью данной работы является получение и оптимизация состава липосомальной формы эфАст, модифицированной трёхблочным сополимером «Плюроник F68», на основе фосфолипида Lipoid S75 с высокой концентрацией эфАст и изучение антиоксидантной активности полученных липосом.

Липосомы с различной концентрацией плуроника от 0,1% до 4% и высоким содержанием эфАст (0,5 мг/мл) были получены выпариванием хлороформа из водного раствора плуроника. Методом динамического рассеяния света были определены размеры липосом и их индекс полидисперсности (PdI). Дзета-потенциал липосом с плуроником находился в диапазоне -35 ± 15 мВ. Наибольшую стабильность показали частицы небольшого размера с концентрацией плуроника 0,3-1%, а системы с использованием 0,5% раствора плуроника оставались стабильными даже спустя 2 недели хранения в темноте при 5°C.

Антиоксидантную активность полученных липосом изучали при тушении радикала ABTS [3]. После 90 минут инкубации липосом с ABTS процент удаления катион-радикала, определяемый по снижению оптической плотности, в системах с эфАСТ оказался выше, чем без него. Это подтверждает наличие антиоксидантных свойств у эфАСТ, включенных в липосомальную форму. В липосомах без модификатора, нагруженных эфАСТ, антиоксидантный эффект составил около 17%, с плуроником F68 – 25%. В качестве контроля использовали раствор ABTS катион-радикала без добавления липосом.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский Институт» (пункт 1п.4.3 “Выявление комплекса био- и нейровизуализационных маркеров высокого риска развития болезни Альцгеймера и ключевых иммунных, иммуногенетических ...” Темплана на 2023 г.; приказ № 86 от 20 января 2023 г.) и темы государственной регистрации №121031600197-5 МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. Rodrigues E. et al. Scavenging capacity of marine carotenoids against reactive oxygen and nitrogen species in a membrane-mimicking system // Mar. Drugs. 2012. Vol. 10, № 8. P. 1784-1798.
2. Böhm F. et al. Interactions of dietary carotenoids with activated (singlet) oxygen and free radicals: Potential effects for human health // Mol. Nutr. Food Res. 2012. Vol. 56, № 2. P. 205-216.
3. Chintong S. et al. In Vitro Antioxidant, Antityrosinase, and Cytotoxic Activities of Astaxanthin from Shrimp Waste // Antioxidants. 2019. Vol. 8. P. 1-11.

Влияние перекрёстной адаптации на пищевое поведение крыс с витальным стрессом

П. А. Матвеевская¹, Н. К. Апраксина¹, С. Г. Цикунов¹

E-mail: matveevskaya2000@mail.ru

¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург, Россия

Широкое распространение насилия и учащение техногенных катастроф в современном мире делают всё более актуальным изучение последствий переживания психотравмирующих обстоятельств. Изменение пищевого поведения на фоне стресса, включающего изменение аппетита и веса, представляет собой симптомокомплекс, характерный для депрессивного расстройства [1]. Перекрёстная адаптация повышает резистентность к всевозможным гетеротипическим стрессорам, что может послужить основой адаптационной профилактики психических расстройств, вызванных витальным стрессом [2].

Исследование было выполнено на половозрелых самцах крыс породы Wistar массой 470,5±0,1 г (n=24). Животные были разделены на три группы: группа 1 - подвергались вынужденному плаванию (n=7), группа 2 - переживали витальный стресс (n=7), группа 3 - подвергались вынужденному плаванию и витальному стрессу (n=10). Животных группы 1 подвергали непредсказуемому стрессу в тесте «Порсолта» в течение 6 минут; группы 2 - витальному стрессу, вызванному переживанием обстоятельств гибели сородича от действий хищника - тигрового питона в течение 20-30 минут [3]; группу 3 подвергали сочетанному воздействию стрессов с разницей в один день. Пищевое поведение животных оценивали по показателю прироста веса за 10 дней и суточного потребления корма. Оценку прироста веса и суточное потребление корма проводили во всех группах животных до воздействия и через сутки после стресса.

После физического стресса у большинства животных наблюдается увеличение массы тела, воздействие психогенной травмы вызывает также повышение веса. При сочетанном воздействии стрессов разного генеза выявлено достоверное снижение веса самцов крыс у большинства животных, что обусловлено развитием анорексигенного типа пищевого поведения, в отличие от влияния отдельных травм с развитием орексигенного типа нарушений [4]. Воздействие физического стресса и сочетанное влияние травмы не вызвало достоверных изменений в показателях суточного потребления корма в отличие от контроля, что объясняется разнонаправленными эффектами стресса. Кроме того, характер нарушений пищевого поведения может свидетельствовать о развитии разных форм депрессии, вызванной стрессом, с повышенным аппетитом на фоне меланхолической депрессии и пониженным при атипической депрессии. При сочетанном воздействии стрессов разного генеза не выявлено изменений суточного потребления корма, что свидетельствует о повышении резистентности животных, переживших витальный стресс.

Полученные данные вносят вклад в понимание механизмов развития психоневрологических расстройств поведения при стрессе, а также важны для дальнейшей разработки методов коррекции пищевого поведения при витальном стрессе.

1. Незнанов Н. Г. и др. Атипичная депрессия: от фенотипа к эндофенотипу // Социальная и клиническая психиатрия. 2016. Т. 26. № 3. С. 5–16.
2. Зенько М. Ю., Рыбникова Е. А. Перекрестная адаптация: от Ф.З. Меерсона до наших дней. Часть 1. Адаптация, перекрестная адаптация и перекрестная сенсбилизация // Успехи физиологических наук. 2019. Т. 50. № 4. С. 3-13.
3. Цикунов С. Г. Нейробиология витального стресса. Новые модели психической травмы и посттравматического стрессового расстройства // Обзоры по клинической фармакологии и лекарственной терапии. 2015. Т. 13. С. 187–188.
4. Ortolani D. et al. Effects of comfort food on food intake, anxiety-like behavior and the stress response in rats // Physiology and Behavior. 2011. V. 103. P. 487–492.

Взаимодействие ДНК в комплексах с ионами железа (III) с катехином

Д.А. Никитин, Н.А. Касьяненко

E-mail: st075754@student.spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Среди веществ, встречающихся в растениях, используемых в качестве компонентов медицинских препаратов, в последнее время большой интерес вызывают флавоноиды. Среди них особое внимание уделено катехинам, которые содержатся в чае, вине, фруктах, [1]. В частности, была установлена заметная противоопухолевая активность галлата эпигаллокатехина наравне с другими катехинами [2]. Препараты на основе катехинов должны отличаться биосовместимостью и отсутствием побочных эффектов. На данном этапе ведутся исследования по включению катехинов в состав многокомпонентных систем с целью усиления их биологической активности, что, например, осуществляется в присутствии ионов трёхвалентного железа [3].

Целью представленного исследования было изучение взаимодействия (+)-катехинов с ионами трёхвалентного железа в растворе, а также с ДНК и железом одновременно, так как ДНК остаётся основной мишенью противоопухолевых препаратов.

Для исследования были приготовлены водно-солевые растворы 0,005 М NaCl с использованием препаратов (+)-катехина, FeCl₃ и высокомолекулярной тимусной ДНК фирмы Sigma Aldrich.

Спектры поглощения катехина в растворах не изменялись в присутствии различных концентраций хлорида железа, однако данные динамического рассеяния света указывают на наличие в этих же растворах двух типов дискретных наночастиц с гидродинамическими радиусами (40±10) нм и (200±50) нм. При этом формируемые ассоциаты отличаются устойчивостью, о чём свидетельствует полученные методом атомной силовой микроскопии изображения частиц на поверхности свежесколотой слюды.

Взаимодействие катехинов с ДНК в растворах экспериментально не наблюдалось: вязкость растворов и спектры поглощения ДНК в присутствии различных концентраций катехина совпадали с параметрами, полученными для свободной ДНК.

Растворы с присутствием трёхкомпонентных систем несколько отличались по своим характеристикам в зависимости от порядка смешивания компонентов. Между тем, данные разных методов свидетельствуют о формировании комплексов, в которых ДНК взаимодействовала с ионами железа и катехином одновременно. Так, результаты методов низкоградиентной вискозиметрии и динамического рассеяния света показали падение размеров клубка ДНК в присутствии ионов железа, что вызвано изменением полиэлектролитного набухания макромолекулы. Присутствие катехинов тоже оказывает влияние на тройные системы: размеры макромолекулы в них отличается и от размеров ДНК в комплексах с ионами железа, и от размеров свободной ДНК. Это говорит о формировании комплексов ДНК-катехин-ионы железа.

На основании проведённой работы можно заключить, что катехины не вступают во взаимодействие с молекулой ДНК в растворе, но в присутствии ионов трёхвалентного железа возможно образование комплексов ДНК с катехинами и ионами железа.

1. Cadoná, F. C., Dantas, R. F., de Mello, G. H., & Silva-Jr, F. P. (2021). Natural products targeting into cancer hallmarks: An update on caffeine, theobromine, and (+)-catechin. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 1–20. DOI:10.1080/10408398.2021.1913091.
2. Farhan, M.; Rizvi, A.; Ahmad, A.; Aatif, M.; Alam, M.W.; Hadi, S.M. Structure of Some Green Tea Catechins and the Availability of Intracellular Copper Influence Their Ability to Cause Selective Oxidative DNA Damage in Malignant Cells. *Biomedicines* 2022, 10, 664. <https://doi.org/10.3390/biomedicines10030664>
3. Manna, M. S., Saha, P., Ghoshal, A. K. (2014). Iron complexation of pharmaceutical catechins through selective separation. *RSC Advances*, 4, 26247-26250 DOI:10.1039/c4ra03683b.

Влияние радиомиметика блеомицина и малых доз ионизирующего излучения на репарацию ДНК в дермальных фибробластах человека

А.В. Ноздрачева^{1, 2}, М.Л. Куранова¹

E-mail: shurupchi@mail.ru

¹Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

Ионизирующее излучение (ИИ) и различные химические агенты могут вызывать различные повреждения ДНК, в основном двунитевые разрывы ДНК (ДР), одностандетные разрывы ДНК (ОР), несовпадения, модифицированные основания и абазические сайты, которые связаны с различными видами заболеваний человека [1]. Если повреждения ДНК не репарированы должным образом, остаточные повреждения могут привести к потере генетического материала и гибели клеток, а неправильно репарированные повреждения могут привести к генным мутациям, хромосомным абберациям, клеточным трансформациям, канцерогенезу и т. д. Таким образом, точная репарация повреждений, в особенности таких серьезных, как двунитевые разрывы ДНК, необходима для снижения риска для здоровья, вызванного повреждающими ДНК факторами [3].

Хотя репарация индуцированных ИИ ДР ДНК хорошо изучена при остром облучении и воздействии химических агентов (например, ДНК-алкилирующем соединении, широко применяемом в антиопухолевой терапии, блеомицине), ответы на ДР ДНК, вызванные непрерывным или хроническим воздействием ионизирующего излучения, недостаточно хорошо охарактеризованы [4]. ИИ обычно принято рассматривать, как повреждающий агент, однако, описан стимулирующий репарацию ДНК эффект при низкоинтенсивной радиации [2].

Цель данной работы - показать разницу воздействия блеомицина и разных доз ионизирующего излучения на процессы репарации ДНК в дермальных фибробластах человека здорового донора и пациентов с нарушениями процессов репарации ДНК (пациенты с атаксией-телеангиэктазией и синдромом коккейна). С помощью метода непрямой иммунофлуоресценции были выявлены изменения разных параметров (количества, интенсивности флуоресценции, площади) фокусов репарационного белка MRE11A и фосфорилированной формы ключевой протеинкиназы репарационного ответа pATM, через определенные промежутки времени после облучения ионизирующим излучением в дозах 0,3 Гр и 2 Гр, после повторного облучения в дозе 2 Гр через сутки, а также после воздействия радиомиметиком блеомицином в концентрации 200 мкг/мл.

Через сутки после воздействия ионизирующего излучения в дозе 2 Гр, последовавшего через 24 часа после первого воздействия ионизирующего излучения в дозе 0,3 Гр, было выявлено наименьшее количество фокусов MRE11A и pATM в дермальных фибробластах как у здоровых доноров, так и у пациентов с нарушениями репарации ДНК. В результате был показан стимулирующий репарацию ДНК эффект при дозе ионизирующего излучения в 0,3 Гр, как в клеточных линиях здоровых доноров, так и пациентов с нарушением процессов репарации ДНК, в отличие от влияния ионизирующего излучения в дозе 2 Гр и радиомиметика блеомицина, при воздействии которого активизируются другие пути репарации ДНК, нежели после воздействия ионизирующего излучения.

1. Jackson S. P., Bartek J. The DNA-damage response in human biology and disease. *Nature*. 2009; 461 (7267): 1071–1078.
2. Janiak M.K., Wincenciak M., Cheda A., Nowosielska E. M., Calabrese E.J. Cancer immunotherapy: how low-level ionizing radiation can play a key role. *Cancer Immunol Immunother*. 2017; 66 (7): 819-832.
3. Jeggo P. A., Pearl L. H., Carr A. M. DNA repair, genome stability and cancer: a historical perspective. *Nature Reviews. Cancer*. 2016; 16 (1): 35–42.
3. Tomita M, Morohoshi F, Matsumoto Y, Otsuka K, Sakai K. Role of DNA double-strand break repair genes in cell proliferation under low dose-rate irradiation conditions. *Journal of radiation research*. 2008; 49:557–564.

Остаточные фокусы белков репарации ДНК: роль в формировании клеточных эффектов облучения

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

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

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

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

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

Среди повреждений ДНК, наиболее критичными для дальнейшей судьбы клетки являются двунитевые разрывы ДНК (ДР ДНК) [1]. Образующиеся во время репарации ДР ДНК сложные динамические микроструктуры, состоящие из сотен и тысяч копий белков, участвующих/ассоциированных с процессом репарации, визуализируются после иммуноцитохимического окрашивания в виде ярких точек и называются фокусами белков репарации [1]. Фокусы репарации ДНК, наблюдаемые как через 24 часа, так и через большее время после облучения получили в литературе название остаточных [2]. Полагают, что они представляют из себя сайты репарации сложных, потенциально летальных ДР ДНК [2]. Показано, что увеличение количества остаточных фокусов связано со снижением колониеобразующей способности [3]. Однако особенности их пострадиационных количественных изменений и роль в процессах клеточной гибели и старения, до сих пор изучены недостаточно.

Целью данной работы было изучение взаимосвязи между изменениями количества остаточных фокусов ключевых белков репарации ДНК, участвующих в клеточном ответе на возникновение ДР ДНК (γ H2AX (сенсор), pATM (трансдуктор), 53BP1 (медиатор), p-p53 (эффектор)) и долей сенесцентных, каспаза-3 позитивных, а также аутофагических клеток в фибробластах человека через 24, 48 и 72 ч после воздействия рентгеновского излучения в дозах 1-10 Гр.

Результаты исследований показали, что по количественному выходу остаточных фокусов исследованные белки можно расположить в порядке убывания γ H2AX > 53BP1 > pATM \geq p-p53. С увеличением времени после облучения с 24 до 72 ч количество остаточных фокусов всех исследованных белков снижается. Это снижение можно объяснить несколькими параллельно идущими процессами: элиминацией высокоповрежденных клеток по механизмам апоптоза, аутофагии и т.д.; завершением процесса репарации ДНК и наконец снижением пролиферативной активности клеток сопровождающееся уменьшением количества репликативных повреждений ДНК.

Рентгеновское излучение также приводило к дозозависимому увеличению доли каспазы-3, LC3-II, SA- β -gal положительных и Ki-67 отрицательных фибробластов через 24 ч после облучения в дозах 1-10 Гр. К 72 ч после облучения доля каспазы-3 и LC3-II положительных клеток уменьшается, в то время как доля стареющих клеток, наоборот, увеличивается. Примечательно, что старение и аутофагия действуют как партнеры, усиливая друг друга и противодействуя апоптозу.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ №22-2400490

1. Bushmanov, A.; Vorobyeva, N.; Molodtsova, D.; Osipov, A.N. Utilization of DNA double-strand breaks for biodosimetry of ionizing radiation exposure. *Environmental Advances* 2022, 8.
2. Banath, J.P.; Klokov, D.; MacPhail, S.H. et al. Residual gammaH2AX foci as an indication of lethal DNA lesions. *BMC Cancer* 2010, 10, 4.
3. Babayan, N.S.; Guryev, D.V.; Vorobyeva, N.Y. et al. Colony-Forming Ability and Residual Foci of DNA Repair Proteins in Human Lung Fibroblasts Irradiated with Subpicosecond Beams of Accelerated Electrons. *Bull Exp Biol Med* 2021, 172, 22-25.

Система для индукции нокаута гена *Stat1* у лабораторных мышей, экспрессирующих *Cre-ER*

А.К. Прокопович, Д.В Юдкин

E-mail: PolinaP040900@mail.ru

ФБУН Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор» Роспотребнадзора,
Новосибирск, Россия

Иммунодефицитные лабораторные животные являются широко используемыми моделями в различных медико-биологических исследованиях. Иммунодефицит у таких животных зачастую обусловлен нарушением экспрессии различных генов, участвующих в специфическом или неспецифическом иммунном ответе. Появление методов генетической инженерии и геномного редактирования позволяет использовать трансгенез для того, чтобы получать линии животных с нокаутированными генами иммунного ответа. Так на сегодня существуют мыши *RAG1*, *Nude*, *Scid*, *NOD* проявляющие разные виды иммунодефицитов. Одной из основных мишеней для нокаута служат гены участников каскадов интерферонового ответа, например *Ifnar1*, *Ifnar2*, *Stat1* и другие [1, 2].

Иммунодефицитные животные требуют особых условий содержания, в свободной от патогенов среде. Однако, благодаря достижениям технологий трансгенеза в настоящее время возможно получать лабораторных животных с индуцируемым иммунодефицитом, которых содержат в конвенциональной среде, и непосредственно перед экспериментом индуцируют иммунодефицит.

Ген *Stat1* (Signal transducer and activator of transcription) кодирует активатор транскрипции и экспрессируется под действием цитокинов. Этот белок регулирует экспрессию генов апоптоза при различных стресс-индуцированных реакциях. Лабораторные животные не экспрессирующие белок *Stat1* имеют подавленный интерфероновый ответ и, таким образом, проявляют иммунодефицит из-за отсутствия неспецифической реакции на вирусные патогены [3].

Мы представляем генетическую систему, основанную на технологии CRISPR/Cas9 для внесения LoxP сайтов, фланкирующих экзон, длина которого не кратна трем нуклеотидам, в ген *Stat1* мыши. Для получения трансгенных животных необходимо использовать линии мышей, несущих ген *Cre-ER* – химерной Cre-рекомбиназы, соединенной с лиганд-связывающим доменом эстрогенового рецептора. Такой комплекс при индукции обеспечивает миграцию химерного белка в ядро. Это приводит к необратимой делеции фланкированного экзона со сдвигом рамки считывания и, как следствие, потере белка *Stat1* и развитию иммунодефицитного состояния.

Исследование проводилось в рамках выполнения государственного задания ФБУН Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор» Роспотребнадзора

1. Belizário J. E. Immunodeficient mouse models: an overview // The open immunology journal. 2009. Т. 2. № 1. С. 79-85.
2. Takaki H. et al. Development of mouse models for analysis of human virus infections // Microbiology and immunology. 2017. Т. 61. №. 3-4. С. 107-113.
3. Shtrichman R., Samuel C. E. The role of gamma interferon in antimicrobial immunity // Current opinion in microbiology. 2001. Т. 4. №. 3. С. 251-259.

**Стерические деформации при виртуальном скрининге лигандов
на примере низкомолекулярных ингибиторов развития АТТР-амилоидоза**

В.К. Румянцева^{1,2}, М.Г. Петухов²

E-mail: rumyantseva_valery@niuitmo.ru

¹ Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

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

В последнее время значительные продвижения были сделаны в изучении конформационных болезней, к числу которых относится амилоидоз. Благодаря множеству исследований был установлен гетерогенный белковый состав амилоидных фибрилл, что способствовало созданию классификации амилоидоза и изучению механизмов развития отдельных групп. Актуальность изучения амилоидоза, вызванного фибриллами ТТР, является его опасность, заключающаяся в быстром развитии внутри организма. К областям поражения относятся, преимущественно, периферическая нервная система или сердце, а также желудочно-кишечный тракт, почки, связки, глазные яблоки, что влечет за собой потерю функции органов и тканей [1].

В данной работе мы использовали методы компьютерного моделирования и виртуального скрининга лигандов для поиска низкомолекулярных ингибиторов развития АТТР-амилоидоза. Пространственные структуры амилоидных фибрилл ТТР включают в себя полости, которые могут оказаться ключом к разработке лекарственных соединений против роста амилоидных фибрилл. Исследуя механизм связывания комплекса лиганд-белок, мы обнаружили, что в процессе виртуального скрининга возникают искусственные стерические деформации, искажающие результаты итоговой выборки лигандов. Энергии стерических деформаций лигандов включают внутримолекулярные компоненты невалентных взаимодействий, связанных с вращением свободных торсионных углов лигандов, включая Ван-дер-Ваальсовы и торсионные взаимодействия [2,3]. В работе рассчитывалась энергия стерических деформаций лигандов амилоидных фибрилл транстиретина после докинга, а также после докинга с последующей локальной минимизацией энергии в центре связывания белка для библиотек ультракоротких пептидов и коммерчески доступных лекарственно подобных соединений. Релаксация лигандов в полости амилоидных фибрилл проводилась с помощью стандартного метода локальной минимизации конформационной энергии комплекса. При этом в список переменных минимизации, кроме переменных подвижного лиганда, были также включены подвижные торсионные углы боковых цепей аминокислотных остатков белка-рецептора, находящиеся в прямом контакте с лигандом.

Предложенный метод молекулярной релаксации не только улучшает характеристики связывания 1% лучших лигандов, но, что самое главное, изменяет на ~50% результирующий состав потенциальных ингибиторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке «КГЦ – ПИЯФ» (соглашение 075-15-2019-1663)

1. Wechalekar A. D., Gillmore J. D., Hawkins P. N. Systemic amyloidosis //The Lancet. – 2016. – Т. 387. – №. 10038. – С. 2641-2654.
2. Tong J., Zhao S. Large-scale analysis of bioactive ligand conformational strain energy by ab initio calculation //Journal of Chemical Information and Modeling. – 2021. – Т. 61. – №. 3. – С. 1180-1192.
3. Gu S. et al. Ligand strain energy in large library docking //Journal of Chemical Information and Modeling. – 2021. – Т. 61. – №. 9. – С. 4331-4341.

Комплексный подход для поиска потенциально амилоидогенных белков человека

М.В. Рябинина¹, А.А. Зелинский¹, А.А. Рубель¹

E-mail: marina.ryabinina.v@gmail.com

¹Научная лаборатория биологии амилоидов СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Интерес к амилоидам – самособирающимся фибриллярным белкам с межмолекулярной кросс-β структурой – обусловлен их ролью в патогенезе множества заболеваний человека, среди которых болезни Альцгеймера и Паркинсона, диабет II типа, некоторые типы рака, а также их участием в биологических процессах как у прокариот, так и у эукариот [1, 2]. Список белков, способных формировать патологические и функциональные амилоиды, постоянно пополняется, при этом их количество может быть гораздо больше, чем известно на данный момент.

Целью данной работы являлось провести поиск потенциальных амилоидогенных белков человека и проанализировать их амилоидные свойства *in vivo* и *in vitro*.

На первом этапе мы использовали биоинформатические алгоритмы ArchCandy [3] и AmylPred2 [4] для поиска потенциальных кандидатов в амилоиды. Затем мы проверили предсказания, используя разработанную под руководством Ю.О. Чернова оригинальную дрожжевую тест-систему, которая позволяет выявлять амилоидогенный потенциал у белков по фенотипу – рост/отсутствие роста генно-модифицированных дрожжей на селективных средах. Мы проанализировали амилоидогенный потенциал более 20 рекомбинантных белков, у которых ранее была предсказана склонность к амилоидной агрегации биоинформатически. В настоящее время мы исследуем амилоидные свойства белков, продемонстрировавших амилоидный потенциал в дрожжевой модели, *in vitro* и в бактериальной системе C-DAG [5], а также в культуре клеток человека НЕК293Т. Применение комплексного подхода, предложенного нами, позволит выявить новые потенциальные амилоиды у человека и проверить предсказания различных биоинформатических алгоритмов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 20-14-00148-П), а также Санкт-Петербургского Государственного Университета (проект № 94031363)

1. Rubel M. S. et al. Functional mammalian amyloids and amyloid-like proteins //Life. 2020. V. 10. No. 9. P. 156.
2. Mativ A. B. et al. Amyloid and amyloid-like aggregates: Diversity and the term crisis //Biochemistry (Moscow). 2020. V. 85. No. 9. P. 1011-1034.
3. Ahmed A.B., Znassi N., Château M., Kajava A.V. A structure-based approach to predict predisposition to amyloidosis // Alzheimer's & Dementia. 2015. V. 11. No. 6. P. 681-690.
4. Tsolis A. C. et al. A consensus method for the prediction of 'aggregation-prone' peptides in globular proteins //PloS one. 2013. V. 8. No. 1. P. e54175.
5. Sivanathan V., Hochschild A. A bacterial export system for generating extracellular amyloid aggregates //Nature protocols. 2013. V. 8. No. 7. P. 1381-1390.

Исследование роли N-конца белка MSL1 в распознавании X-хромосомы в процессе дозовой компенсации у *Drosophila melanogaster*

В.Е. Рыжкова, В.А. Бабоша, Е.А. Тихонова, П. Г. Георгиев, О. Г. Максименко

E-mail: varvara.e.ryzhkova@gmail.com

Институт биологии гена РАН, Москва, Россия

Реализация дозовой компенсации генов X-хромосомы у самцов *Drosophila melanogaster* происходит за счет работы комплекса дозовой компенсации (КДК). Каждый из белков комплекса (MSL1, MSL2, MSL3, MOF и MLE) является жизненно важным для самцов мух. КДК способен специфично распознавать X-хромосому, и такое специфическое распознавание является уникальной моделью для изучения механизмов и специфичности работы комплексов, регулирующих экспрессию генов. Белок MSL1 взаимодействует с MSL2 за счет своего альфа-спирального домена на N-конце белка, расположенного участке 98-176 а.о., образуя коровую часть КДК, способную самостоятельно распознавать определенные сайты на X-хромосоме [1,2]. Ранее было показано [1,2], что N-конец белка MSL1 играет критическую роль в реализации дозовой компенсации, а его удаление повышает летальность самцов и дестабилизирует КДК. Белок MSL1 может независимо от КДК связываться с промоторами генов, расположенных на всех хромосомах и участвовать в активации транскрипции [1,2].

Целью настоящего исследования была идентификация доменов в MSL1, которые участвуют в рекрутировании белка MSL1 на промоторы и в составе КДК на X хромосому самцов. С помощью двугибридной системы нами был проведен скрининг, в результате которого были выявлены транскрипционные факторы с доменами типа цинковые пальцы (ZnF-белки), взаимодействующие с белком MSL1, а также были определены два участка взаимодействия MSL1 и ZnF-белков на N-конце белка MSL1: 1-15 а.о. и 66-85 а.о. Для дальнейшего исследования функций этих участков был получен набор трансгенных линий мух, несущих кодирующие конструкции вариантов укороченного белка MSL1: MSL1[1-263] (*wt*), MSL1[15-263] ($\Delta 15$) и MSL1[15-263] $\Delta 66-85$ ($\Delta 15+66$) под контролем сильного убиквитинового промотора и соединенных с NLS и HA-эпитопом, интегрированные по сайту *attP* на место делеции эндогенного *msl-1*. MSL1[1-263] формирует коровый комплекс с MSL2, в который не входят белки MOF и MSL3, взаимодействующие с C-концом MSL1. При иммуноокрашивании препаратов политенных хромосом слюнных желез самок 3й личиночной стадии, продуцирующих также MSL2, в линии *wt* были обнаружены многочисленные сайты связывания MSL1[1-263]/MSL2 на всех хромосомах в междисках. В линии $\Delta 15$ заметно снижалось количество сайтов взаимодействия этих белков с ДНК и нарушалась колокализация MSL1 и MSL2, а в линии $\Delta 15+66$ мы не наблюдали MSL1 на хромосомах, при сопоставимом количестве сайтов MSL2 по сравнению с линией $\Delta 15$.

Результаты в двугибридной системе и на политенных хромосомах коррелируют между собой и демонстрируют, что N-конец MSL1 отвечает за специфические взаимодействия с ZnF-белками, что имеет ключевое значение для рекрутирования на промоторы генов. Неожиданно оказалось, что коровой MSL1/MSL2 комплекс не имеет высокой специфичности к X-хромосоме и способен связываться с аутосомами в отличие от полного КДК.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 21-14-00211 и субсидии Министерства науки и высшего образования РФ № 075-15-2019-1661

1. Samata M, Akhtar A. Annu Rev Biochem. 2018 87:323-350. doi: 10.1146/annurev-biochem-062917-011816. 2. Kuroda MI, Hilfiker A, Lucchesi JC. Genetics. 2016 204:435-450. doi: 10.1534/genetics.115.185108.
2. Kuroda M. I., Hilfiker A., Lucchesi J. C. Dosage compensation in *Drosophila*—a model for the coordinate regulation of transcription //Genetics. – 2016. – Т. 204. – №. 2. – С. 435-450.

Модификация чувствительного слоя оптического биосенсора разветвленными и сверхразветвленными полимерами для улучшения его аналитических параметров

Р.И. Шакуров¹, С.В. Сизова¹, С.П. Дудик¹, Д.В. Басманов^{1,2}

E-mail: r.shakurov@sysbiomed.ru

¹Федеральное бюджетное учреждение науки «Научно-исследовательский институт системной биологии и медицины», Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины имени академика Ю.М. Лопухина ФМБА, Москва, Россия

Разработка лекарственных препаратов, диагностических методов основанных на детекции низкомолекулярных соединений в биологических жидкостях, требуют инструментов быстрого и чувствительного обнаружения искомого вещества. Таким инструментом является биосенсор на поверхностных волнах в одномерном фотонном кристалле (ОФК). Рабочей поверхностью такого биосенсора является слой оксида кремния - завершающий слой многослойной структуры ОФК.

Важнейшими характеристиками чувствительности биосенсора являются предел обнаружения и предел количественного определения. Изучаемые биохимические реакции характеризуются малым количеством искомым молекул, а также, часто и низкой молекулярной массой, порядка 1кДа. Повысить чувствительность метода можно, создав развитое в пространстве, структурированное покрытие ОФК, позволяющее максимально увеличить плотность посадки биомолекул [1].

В данной работе была исследована модификация ОФК с помощью разветвленных полимеров полиэтиленimina (ПЭИ), и сверхразветвленных полимеров – дендримеров полиамидоамина (ПАМАМ). Объектами исследования выступали белки – бычий сывороточный альбумин (БСА) и стрептавидин, и олигонуклеотидные последовательности (ОП) малой молекулярной массы. Исследуемые растворы пропускались над предварительно модифицированной поверхностью ОФК через микрофлюидную кювету, вызывая, в результате своего взаимодействия с поверхностью, изменение параметров возбуждения поверхностной волны. Отслеживание результатов изменения этих параметров позволяло получить кривую сорбции лиганда на модифицированную поверхность ОФК. В качестве независимого метода, подтверждающего создание разветвленной структуры на поверхности, использовалась атомно-силовая микроскопия в жидкой фазе.

Метод модификации поверхности ПАМАМ позволил достичь предела обнаружения 20 пг/мл для белка, и предела количественного определения 70 фМ/мл для ОП [2]. В свою очередь, модификация поверхности посредством ПЭИ наибольшим образом подходит для разработки скрининговых методик обнаружения патогенов в биологических жидкостях, так модификация рабочей поверхности ОФК происходит непосредственно в микрофлюидной кювете, и время, необходимое для модификации, составляет не более 5 минут.

1. Sizova S.V., Shakurov R.I., Mitko T.V., et al. The Elaboration of Effective Coatings for Photonic Crystal Chips in Optical Biosensors // Polymers. 2022. Vol.14. Issue 1. P.152.
2. Shakurov R.I., Sizova S.V., Dudik S.P., et al. Dendrimer-Based Coatings on a Photonic Crystal Surface for Ultra-Sensitive Small Molecule Detection // Polymers. 2023. Vol.15. P.2607.

Методики высокопроизводительного секвенирования в реальной клинической практике врача-онколога: результаты ретроспективного когортного исследования

П.С. Шило¹

Email: polinashilo0@gmail.com

¹ ООО "Лакта клиника", Санкт-Петербург

В Российской Федерации в 2021 году было выявлено 580 415 новых случаев онкологических заболеваний, из них 20,5% были диагностированы в IV стадии [1]. Пятилетняя выживаемость пациентов с распространенными формами онкологических заболеваний не превышает 30%, в связи с чем необходим поиск дополнительных вариантов противоопухолевого лечения [1].

Одним из возможных направлений поиска новых стратегий лечения является применение геномного профилирования опухоли с применением методик высокопроизводительного секвенирования [2]. Методики геномного профилирования все чаще используются в рутинной клинической практике для поиска дополнительных терапевтических опций у онкологических пациентов с исчерпанными возможностями лекарственной терапии. Данный подход предусматривает назначение молекулярно-направленной терапии пациентам с таргетируемыми альтерациями, которые могут быть обнаружены методом высокопроизводительного секвенирования (NGS) [2].

В данном докладе будут рассмотрены результаты одноцентрового ретроспективного когортного исследования, в рамках которого проводилась оценка распространенности потенциально таргетируемых биологических событий, выявленных методом NGS в биологическом материале пациентов, частота назначения молекулярно-направленной терапии и показатели её эффективности в условиях реальной клинической практики.

Результатом данной работы является определение целесообразности применения методик высокопроизводительного секвенирования в онкологической практике Российской Федерации.

1. Состояние онкологической помощи населению России в 2021 году. – Под ред. А.Д. Каприна, В.В. Старинского, А.О. Шахзадовой. – М.: МНИОИ им. П.А. Герцена – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, 2022. – илл. – 239 с. ISBN: 978-5-85502-283-4
2. Mosele F, Remon J, Mateo J, et al: Recommendations for the use of next-generation sequencing (NGS) for patients with metastatic cancers: A report from the ESMO Precision Medicine Working Group. Ann Oncol 31:1491-1505, 2020.

Внутриклеточное развитие микроспоридии *Nosem bombycis* в клеточной линии Sf9

А.Г. Шухалова, И.В. Сендерский, В.В. Долгих

E-mail: nastyadzh@mail.ru

Всероссийский научно-исследовательский институт защиты растений, г. Санкт-Петербург, Пушкин, Россия

Микроспоридии – это группа эукариотических внутриклеточных паразитов, которые могут заражать почти всех позвоночных и беспозвоночных животных [1]. Период попадания спор в организм хозяина является самым подходящим для борьбы с паразитом, так как на данном этапе микроспоридии не защищены оболочкой. Однако для паразита *Nosema bombycis* – возбудителя пембины шелковичного червя *Bombyx mori*, при его культивировании в этой культуре клеток насекомого было показано образование двух типов спор [2].

В этой работе мы изучили особенности развития и размножения микроспоридии *N. bombycis* в искусственно зараженной клеточной линии Sf9, полученной из ткани яичника кукурузной лиственной совки *Spodoptera frugiperda*. Споры, выделенные из зараженных насекомых в Узбекском Научно-Исследовательском Институте Шелководства, активировали в щелочных условиях и добавляли в планшеты к клеточной культуре. Далее в течение 7 дней из культуры отбирали пробы для микроскопирования и количественного анализа уровня экспрессии генов паразита в зараженной культуре клеток с помощью обратной транскрипции и количественного ПЦР в реальном времени. В качестве генов с более ранней транскрипционной активностью, вовлеченных в процесс репликации генома *N. bombycis*, были выбраны последовательности, кодирующие дельта субъединицу ДНК-полимеразы и ДНК-лигазы паразита. В качестве генов, активируемых позднее и вовлеченных в спорогенез *N. bombycis*, были выбраны последовательности, кодирующие белок полярной трубки РТР2 и белок оболочки споры SWP32 паразита. Высокий и стабильный уровень экспрессии транскриптов двух последних белков в зараженных клетках линии Sf9 был показан нами ранее [3].

Микроскопический анализ выявил развитие паразита в зараженных клетках линии Sf9 в первые дни после добавления в культуру активированных спор. Сформированные в зараженных клетках свежие споры *N. bombycis* отличались от спор, использованных для инокуляции более тонкой оболочкой, будучи более прозрачными. При этом мы не наблюдали увеличения доли зараженных клеток в культуре в течение 7 дней с момента добавления активированных спор. Уровень экспрессии четырех изученных генов *N. bombycis* в зараженной культуре значительно возрастал в течение первых трех дней после добавления активированных спор, но затем «выходил на плато», оставаясь неизменным в течении 4-7 дней и для более «ранних» генов репликации, и для более «поздних» генов, вовлеченных в процесс формирования спор.

Полученные данные позволяют заключить, что в случае заражения клеточной линии Sf9 микроспоридией *N. bombycis*, развитие паразита происходит только в первоначально инфицированных клетках и сопровождается увеличением в них содержания паразитических транскриптов. Однако перезаражения микроспоридиями новых клеток и дальнейшего роста паразита в культуре Sf9 не происходит. Возможно, это связано с ограниченным потенциалом клеток этой линии для формирования полноценных, инвазионных спор.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 23-16-00247

1. Whelan T.A., Fast N.M. // Microsporidia. Curr Biol. 2023. P. 936-938.
2. Ishihara R. The life cycle of *Nosema bombycis* as revealed in tissue culture cells of *Bombyx mori*. // Journal of invertebrate pathology. 1969. P. 316-320.
3. Dolgikh V.V., Senderskiy I.V., Zhuravlyov V.S., Ignatieva A.N., Timofeev S.A., Ismatullaeva D.A., Mirzakhodjaev B.A. Molecular detection of microsporidia *Vairimorpha ceranae* and *Nosema bombycis* growth in the lepidopteran Sf9 cell line. // Protistology 2022. P. 21–29.

Локализация и функциональные особенности TSPYL5 как потенциальной мишени для таргетной терапии ALT-положительных онкологических заболеваний

С.А. Силонов^{1,2}, Е.Ю. Смирнов¹, Е.А. Шмидт¹, А.В. Фонин¹

E-mail: silonovsa@incras.ru

¹ Институт Цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

Одним из путей, по которому раковые клетки поддерживают неограниченный рост, является процесс альтернативного удлинения теломер (ALT), который составляет примерно 15% среди всех раковых заболеваний. Известно, что такие заболевания плохо поддаются химиотерапии, в связи с чем поиск мишеней для таргетной терапии этих заболеваний является актуальным. Характерной особенностью ALT является формирование PML-телец (PML-NB), ассоциированных с процессом альтернативного удлинения теломер (ALT-ассоциированные PML-NB, APB). Процессы, происходящие в APB, остаются слабоизученными и ведутся активные исследования биогенеза таких формирований. Известно, что в состав PML-телец входит ряд белков PML (TRIM19), TRIM27, TSPYL5 и USP7, которые являются на сегодняшний день наиболее интересными кандидатами на роль мишеней для таргетной терапии [1, 2].

Белок TSPYL5 принадлежит к семейству семенников-специфичных Y-кодируемых белков (TSPYL) и играет роль маркера супрессора клеточного роста. Ген, кодирующий белок TSPYL5, остается гиперметилированным практически во всех первичных глиомах и меланоме, а его повышенное метилирование коррелирует с прогрессированием заболеваний, таких как рак желудка и гепатоцеллюлярная карцинома. Кроме того, известно, что TSPYL5 модулирует рост аденокарциномы путем регуляции клеточного уровня p21, а через сигнальный путь PTEN/АКТ помогает повысить устойчивость злокачественных клеток к цитотоксическим агентам и γ -излучению [2]. Несмотря на большой интерес к TSPYL5, локализация и динамические характеристики этого белка оставались неизученными.

В данной работе показано, что белок TSPYL5 может быть локализован в цитоплазме и в ядрышке клеток, при этом локализация белка не зависит от клеточного цикла. Обнаружено, что первые 50 аминокислот белка TSPYL5 отвечают за его локализацию в ядрышке. Установлена одинаковая высокая динамическая способность к восстановлению после фотообесцвечивания (FRAP) как полноразмерного TSPYL5, так и его фрагментов (1-50 амк., 1-198 амк.), что говорит о существенном вкладе неупорядоченного N-концевого фрагмента в локализацию и динамические характеристики этого белка. Обнаружена специфичная колокализация TSPYL5 в PML-тельцах с TRIM27 и USP7 в клеточных линиях U2OS и A549. Анализ интерактома TSPYL5 показал, что этот белок потенциально является шапероном гистонов и ряда больших субъединиц рибосомы. Полученные данные не только позволяют рассматривать сеть взаимодействий TSPYL5 и TRIM27 как потенциальные мишени для последующей разработки таргетной терапии ALT-положительных онкологических заболеваний, но и позволили углубиться в понимание роли TSPYL5 в этом процессе.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного фонда (грант РФФ № 22-25-00813) и стипендии президента РФ № СП-5364.2022.4

1. Episkopou H., Diman A., Claude E., Viceconte N. and Decottignies A. TSPYL5 Depletion Induces Specific Death of ALT Cells through USP7-Dependent Proteasomal Degradation of POT1 // Mol Cell. 2019. Т. 75. № 3. С. 469- 482.
2. Kim E. J. et al. TSPYL5 is involved in cell growth and the resistance to radiation in A549 cells via the regulation of p21WAF1/Cip1 and PTEN/АКТ pathway // Biochem Biophys Res Commun. 2010. Т. 392. № 3. С. 448–453.

Разработка тест-системы на основе штамма 11D-LMG-3031 дрожжей для мониторинга генотоксичности широкого спектра соединений

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

E-mail: skobeleva_ii@npri.nrcki.ru

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Гатчина, Российская Федерация*

² *«Курчатовский геномный центр – ПИЯФ», г. Гатчина, Российская Федерация*

Проблема изучения воздействия ДНК-тропных агентов на живые организмы, как никогда актуальна. В последние годы появился ряд статей, в которых авторы, изучая действие ДНК-тропных агентов, показывают, что ключевую роль в этих эффектах играет пострепликативная репарация [1]. Клетки в ответ на повреждения ДНК используют сеть сигнальных переносчиков, относящихся к прохождению клеточного цикла (чекпойнт) и к осуществлению репарации повреждений ДНК. Предметом нашего исследования является изучение молекулярных механизмов индуцированного мутагенеза у дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*. Ошибки, появившиеся в процессе репарации, приводят к возникновению мутаций, генетической нестабильности, возникновению раковых заболеваний и клеточной гибели [2].

Ранее в нашей лаборатории впервые в мире с помощью прямого скрининга были выделены мутанты дрожжей, отличающихся повышенным индуцированным мутагенезом и практически не измененной чувствительностью к летальному действию мутагенов. Было показано, что причиной повышенного мутагенеза у этих мутантов является привлечение часто ошибающихся ДНК полимераз в ходе репаративного синтеза ДНК. На основании этих данных мы сделали вывод, что подобные мутанты могут с успехом использоваться для создания тест-систем для оценки генотоксичности различных веществ и обнаружения генотоксикантов в окружающей среде. Мутант *apn1Δ (MATα ade 2Δ -248 ura3-160,188 leu2-3,112 trp1 apn1::URA3)* оказался одним из самых перспективных для данной цели. Мутации *apn1* блокируют репарацию азотистых оснований ДНК, которые являются наиболее массовым видом повреждений при действии химических агентов. Мутация *asf1* приводит к замене репарационных полимераз на ошибочные, при обходе повреждений в ходе репарации, тем самым увеличивает число фиксируемых повреждений ДНК.

Двойной мутант *apn1Δasf1Δ* перспективен для разработки тест-систем из-за возможности учёта низких уровней повреждений азотистых оснований. На базе *apn1Δ* был получен двойной мутант. Показана его высокая чувствительность к малым дозам мутагенов, что позволило подтвердить перспективность использования мутанта *apn1Δasf1Δ* для создания, как тест-системы для оценки генотоксичности различных веществ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Курчатовского геномного центра – ПИЯФ по соглашению № 0488

1. E. A. Alekseeva T. A. Evstyukhina, V. T. Peshekhonov, V. G. Korolev Participation of the HIM1 gene of yeast *Saccharomyces cerevisiae* in the error-free branch of post-replicative repair and role Polη in him1-dependent mutagenesis [Журнал] // Current Genetics. - 2021 г.. - Т. 67. - стр. 141–151.
2. Friedberg Suffering in silence: the tolerance of DNA damage. [Журнал]. - [б.м.] : Nat Rev Mol Cell Biol, 2005 г.. - Т. 6. - стр. 943–953.

Создание генетической конструкции рекомбинантного коклюшного токсина для разработки эффективной вакцины против коклюша

Е.А. Столбова^{1,2}, В.А. Шокина¹, С.А. Доронин¹, А.В. Кудрявцев¹

E-mail: eastolbova_2@edu.hse.ru

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

²Научно-исследовательский институт системной биологии и медицины, Москва, Россия

Вакцины АКДС эффективны в предотвращении коклюша, но часто плохо переносятся и имеют побочные эффекты ввиду токсичности коклюшного компонента вакцины. Переход на бесклеточные вакцины связан с более низкой эффективностью и проблемой "иммунного ускользания". В связи с этим, на сегодняшний день актуальна проблема разработки безопасной эффективной вакцины с возможностью ее модификации в сжатые сроки.

Предложена вакцина на основе субъединичного антигена, где используется каталитическая субъединица коклюшного токсина (PtxA), которая доставляется в составе фьюжн-конструкта с субъединицей RTX аденилатциклазного токсина *Bordetella Pertussis* и запускает иммунные ответы CD4 и CD8 клеток. С целью дополнительного снижения токсичности антигена были произведены генетические замены в последовательности PtxA [1]. Аминокислотная конструкция, соответствующая PtxA, была транслирована в генетическую, синтезирована по методу Гибсона и клонирована в вектор PET28a с помощью безлигазного клонирования. После трансформации компетентных клеток *E. coli* и отбора плазмид со вставкой гена была осуществлена индукция экспрессии гена под T7 промотором с помощью ИПТГ, наработанный белок был выделен методом металл-аффинной хроматографии.

В результате нашего исследования были разработаны три варианта генетических конструкций рекомбинантного антигена. Первая конструкция представлена каталитической субъединицей коклюшного токсина (PtxA), в то время как две другие помимо PtxA имеют в своем составе разные варианты вектора переноса антигена, вызывая активацию CD4+ Т-хелперов посредством МНС II и CD8+ Т-лимфоцитов посредством МНС I соответственно [2]. Наши результаты показывают, что рекомбинантный антиген PtxA воспроизводим в бактериях *E. coli* и может быть адаптирован под различные штаммы и линии в случае "иммунного ускользания". Эффективность терапевтических молекул будет оценена на этапе доклинических исследований.

Работа выполнена в рамках госзадания № 1022040800241-0-1.6.3;1.6.5;3.5.2

1. Ausar, S.F. et al. Genetically detoxified pertussis toxin displays near identical structure to its wild-type and exhibits robust immunogenicity // *Commun Biol* – 2020. – Т. 3. – №. 1. – С. 427.
2. Chenal A., Ladant D. Bioengineering of bordetella pertussis adenylate cyclase toxin for antigen-delivery and immunotherapy // *Toxins*. – 2018. – Т. 10. – №. 7. – С. 302.

Разработка программы молекулярного докинга лекарственных соединений с применением полуэмпирического и SE/MM методов

М. О. Субботин^{1,2}, Р. А. Темиргалиев², Д. А. Павлов^{1,2}, А. В. Митин³

E-mail: maksim@entroforce.ru

¹Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия

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

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

Задача молекулярного докинга является частью процедуры виртуального скрининга, применяющейся на начальных стадиях разработки лекарств. С использованием разработанной программы были рассчитаны оценки энергий связывания лекарственных соединений с белком NRAM методами Vinardo [1], PM7 [2], SE/MM [3] и проведено сравнение результатов. Для белка PCAF проведен виртуальный скрининг 33400 лигандов из базы данных ChEMBL.

В программе реализованы методы подготовки данных: ароматизация, протонирование, восстановление водородов. Основными методами вычисления энергии связывания в программе являются полуэмпирический метод PM7 с неявной моделью водной среды COSMO, реализованный в программе MOPAC [4] и гибридный SE/MM метод. Вычисление энергии связывания гибридным методом выполнялось по схеме вычитания, где в молекулярномеханических расчётах для белков использовалось силовое поле Amber (ff14SB), а для малых лекарственных соединений — силовое поле SMIRNOFF в реализации OpenMM [5].

Для белка NRAM известны 98 лигандов с экспериментально подтвержденным связыванием. Связывание считается устойчивым, если отрицательное значение превышает барьер 8 ккал/моль [6]. Методы показали следующее количество связывающихся с белком лигандов: Vinardo 0, гибридный 8, PM7 с оптимизацией геометрии лиганда в белке 64.

Виртуальный скрининг 33400 лекарственных соединений с белком PCAF был проведен в несколько этапов. На первом этапе проведен глобальный поиск поз лигандов в белке в программе Smina и для полученных поз рассчитана энергия связывания гибридным SE/MM методом. Для второго этапа были отобраны 25% (8340) лучших лигандов по энергии связывания SE/MM метода на которых проведен расчёт методом PM7 без оптимизации геометрии, который отобрал 15% лучших лигандов для следующего этапа. На третьем этапе расчёт проходил методом PM7 с оптимизацией геометрии лиганда в белке. В результате из начального множества было отобрано 3.5% лигандов, в которые входит также лиганд NP2, связывание с которым экспериментально подтверждено.

1. Quiroga R, Villarreal MA. Vinardo: A Scoring Function Based on Autodock Vina Improves Scoring, Docking, and Virtual Screening // PLOS ONE 11(5): e0155183. (2016)
2. Stewart J.J. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. // J Mol Model. 2013 Jan;19(1):1-32.
3. Senn H.M., Thiel W. QM/MM Methods for Biomolecular Systems // Angew. Chem. Int. Ed., 48: 1198-1229.
4. Stewart J.J. MOPAC2016 // Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, HTTP://OpenMOPAC.net (2016).
5. Eastman P., Swails J., Chodera J.D. [et al.]. OpenMM 7: Rapid development of high performance algorithms for molecular dynamics. // PLOS Comp. Biol. 13(7): e1005659. (2017)
6. Kuntz I.D., Chen K., Sharp K.A., Kollman P.A. The maximal affinity of ligands // Proc Natl Acad Sci U S A. 1999 Aug 31;96(18):9997-10002.

Анализ динамики проникновения красителя в ядро клетки на основе данных конфокального микроскопа

А.И. Титов¹, Н.Д. Федорова¹, Е.Ю. Варфоломеева¹, А.В. Швецов^{1,2,3}

E-mail: titov_ai@npri.nrcki.ru

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

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

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

История конфокальной микроскопии насчитывает уже более 80 лет. Существует множество областей исследований, где можно использовать данный метод. В частности, изучение динамики взаимодействия различных веществ с внутренними компартментами клеток.

Конфокальный микроскоп позволяет получать детализированные изображения клеток и их взаимодействия с окружающей средой или другими внешними факторами, в том числе, пусть и с ограничениями, в трёх измерениях. Одно из направлений исследований — изучение структуры укладки хроматина в ядре клетки и определение скорости распространения веществ внутри ядра. В частности анализ диффузии красителя через стенку клеточного ядра с последующим связыванием с молекулами ДНК.

Целью данной работы является анализ динамики проникновения красителя hoechst 33342 [1] в ядро клеток HeLa, который, в последствии, связывается с молекулами ДНК. Преобразование данных изображений конфокальной микроскопии в трёхмерные сети плотности с количественным анализом динамики распространения красителя по объёму ядра клетки.

Для решения этой задачи была написана программа на языке python. Она преобразует исходные файлы конфокального микроскопа в файлы формата «DX», которые можно рассматривать такими программными пакетами как PyMOL [2] и VMD [3], а также рассчитывает ряд параметров, такие как: скорость проникновения красителя через мембрану ядра клетки, параметры диффузии красителя во внутреннем объёме ядра.

В результате был создан метод анализа данных конфокального микроскопа с предоставлением 3d сетей плотности флуоресценции с набором графиков распространения оной в объёме ядра от времени.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме "Функциональная и структурная организация сложных, мультикомпонентных биологических систем и их динамика" (регистрационный номер № 121060200127-6)

1. Bucevičius, Jonas, "The Use of Hoechst Dyes for DNA Staining and beyond", Chemosensors 2018, 6(2), 18; <https://doi.org/10.3390/chemosensors6020018>
2. The PyMOL Molecular Graphics System, Version 2.5, Schrödinger, LLC.
3. Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., "VMD - Visual Molecular Dynamics", J. Molec. Graphics, 1996, vol. 14, pp. 33-38.

Разработка программного обеспечения для анализа результатов нанопорового секвенирования бактериальных генов 16S рРНК

А.Ю. Цветкова^{1,2}, С.А. Булат¹, А.И. Титов¹, А.В. Швецов^{1,2}

E-mail: tsvetkova.anna.at6@gmail.com

¹Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

Нанопоровое секвенирование относится к методам секвенирования третьего поколения и активно используется в исследованиях нуклеотидных последовательностей [1]. Данный метод дает возможность прочтения длинных последовательностей, но одновременно с этим имеет существенный недостаток — большое количество ошибок [2], которые, однако, могут быть компенсированы миллионным количеством прочтений. При обработке необходимо учесть все возможные неточности для получения репрезентативных данных. Работа посвящена разработке программного обеспечения, которое подготавливает нуклеотидные последовательности к последующей классификации по мировым базам данных (Genbank).

Данные, предоставленные для анализа — результаты нанопорового секвенирования продуктов амплификации области v3-v4 бактериальных генов 16S рРНК, полученных из образца замерзшей воды из-под ледника (скважина NGRIP, Гренландия) [3]. Нуклеотидные последовательности после секвенирования содержат в себе вырожденные праймеры, специфические маркеры последовательностей библиотек — баркоды, а также сложной структуры адаптеры. Такие вспомогательные продукты секвенирования препятствуют последующей трактовке результатов и классификации ДНК последовательностей. Кроме того, необходимо учитывать ошибки прочтения, такие как: пропуски, вставки, замены оснований. Конечная цель — получить максимально точно прочитанные последовательности ДНК, пригодные для классификации. Допустимая ошибка чтения задается пользователем.

Для реализации программы был выбран язык программирования C++. За основу был взят алгоритм поиска расстояний Дамерау-Левенштейна [4]. Метод заключается в сравнении строк и выявлении количества различий между ними. Алгоритм был модифицирован: осуществлялся не только поиск различий, но и отсеивание значений, не попадающих в допустимый процент ошибок чтения. Поиск интересующего фрагмента последовательности осуществлялся в 2 этапа: «грубый» и более точный (допустимое количество ошибок равно 70% и 33% соответственно). Такой способ анализа минимизирует вероятность пропустить искомую последовательность или наоборот, выделить участок, не являющийся вырожденным праймером или баркодом.

На данный момент реализован алгоритм нахождения баркодов и вырожденных праймеров. Следующим этапом работы будет подготовка результатов секвенирования для классификации по базам данных, а именно, получение ДНК-последовательностей без баркодов и праймеров, их приведение в нить одного направления, множественное выравнивание с формированием консенсусной последовательности.

1. Ciuffreda L, Rodríguez-Pérez H, Flores C. Nanopore sequencing and its application to the study of microbial communities. *Comput Struct Biotechnol J*. 2021 Mar 7;19:1497-1511. doi: 10.1016/j.csbj.2021.02.020. PMID: 33815688; PMCID: PMC7985215.
2. Бородинов А. Г., Манойлов В. В., Заруцкий И. В., Петров А. И., Курочкин В. Е. ПОКОЛЕНИЯ МЕТОДОВ СЕКВИРОВАНИЯ ДНК (ОБЗОР) // НПИ. 2020. №4.
3. Bulat, S., A. Shvetsov, M. Doronin, J-R. Petit, J.P. Steffensen and D. Dahl-Jensen (2023) Microbial communities under the Greenland ice sheet (NGRIP), as proven by Oxford Nanopore sequencing. The XIII SCAR Biology2023, July 31 - August 03, 2023, Christchurch, NZ, Abstract
4. Fred J. Damerau. 1964. A technique for computer detection and correction of spelling errors. *Commun. ACM* 7, 3 (March 1964), 171–176. <https://doi.org/10.1145/363958.363994>

Микафунгин формирует ион-проницаемые поры в модельных липидных мембранах

А.А. Захарова¹, С.С. Ефимова¹, О.С. Остроумова¹

E-mail: zaza2187@bk.ru

¹*Институт Цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Эхинокандины представляют собой класс противогрибковых препаратов последнего поколения, воздействующих на клеточную стенку и обладающих фунгицидной активностью против некоторых основных грибковых патогенов, включая *Candida* spp. и *Aspergillus* spp. Основной мишенью действия этого класса соединений является 1,3- β -глюкан-синтаза, фермент, ответственный за синтез β -1,3-D-глюкана, основного компонента клеточной стенки [1]. Ранее группой исследователей было показано, что активность каспофунгина и микафунгина в отношении *Candida glabrata* зависит от наличия различных сфинголипидов в мембране [2]. На основании этого можно предположить, что, помимо основного механизма действия эхинокандинов, существует и дополнительный, связанный с действием непосредственно на мембрану.

Целью работы являлось установление способности микафунгина формировать поры в липидных бислоях, состав которых имитирует состав липидной мембраны клеток грибковых патогенов.

Для упрощения интерпретации полученных результатов были выбраны модельные липидные мембраны, сформированные по методу Монтала и Мюллера [3].

Было установлено, что введение микафунгина в 2 М раствор KCl (pH 7.4), омывающий бислоем из смеси пальмитоолеоилфосфатидилхолина и эргостерина (67/33 мол.%), до концентрации 10 - 40 мкМ вызывает появление ступенеобразных флуктуаций тока, протекающего через модельную мембрану, амплитудой от 0.5 до 25 пА при 75 мВ. Увеличение концентрации микафунгина до 60-80 мкМ индуцирует рост трансмембранного тока до 250 пА. Дальнейшее введение микафунгина в примембранный раствор до 100 мкМ приводит к разрушению липидной модельной мембраны. Анализ зависимости макроскопического тока, вызванного присутствием микафунгина, от его концентрации в биологически активных координатах позволяет предположить участие как минимум трех молекул антибиотика в формировании ион-проводящей поры. Введение в мембраноомывающий раствор полифенола 40 мкМ флоретина, способного снижать межфазный скачок электрического потенциала внутри мембраны, а также модулировать трансмембранное распределение латерального давления, приводит к росту порообразующей активности микафунгина в 48 ± 25 раз [4,5]. Полученные данные могут указывать на комплексность действия микафунгина на липидные мембраны, в том числе, на его способность формировать трансмембранные поры в мембранах клеток-мишеней. Молекулярные механизмы образования каналов микафунгином и возможная роль в этом процессе липидного матрикса обсуждается.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта РФФИ № 22-74-10023

1. Douglas C.M. et al. Identification of the FKS1 gene of *Candida albicans* as the essential target of 1,3-beta-D-glucan synthase inhibitors // *Antimicrob Agents Chemother.* 1997 V. 41. No. 11. P. 2471-2479.
2. Healey K.R. et al. CRS-MIS in *Candida glabrata*: sphingolipids modulate echinocandin-Fks interaction // *Mol Microbiol.* 2012. V. 86. No. 2. P. 303-313.
3. Montal M., Muller P. Formation of bimolecular membranes from lipid monolayers and study of their electrical properties // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 1972. Vol. 65, P. 3561-3566
4. Andersen O.S. et al. Effect of phloretin on the permeability of thin lipid membranes // *J Gen Physiol.* 1976. V. 67. No. 6. P. 749-71
5. Tarahovsky Y.S. et al. Rafts making and rafts braking: how plant flavonoids may control membrane heterogeneity // *Mol Cell Biochem.* 2008. V. 314. No. 1-2. P. 65-71

Оценка неспецифической активности CRISPR/Cas9 в дрожжевой модели

А.Р. Шумегга¹, Е.И. Степченкова¹, С.Г. Инге-Вечтомов¹

E-mail: shumega84@mail.ru

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Санкт-Петербург, Россия;

На сегодняшний день, системы на основе CRISPR/Cas9 широко используются для редактирования геномов. На основе CRISPR/Cas9 активно разрабатываются методы генетической модификации растений и других объектов.

Одним из недостатков CRISPR/Cas9 является неспецифическая активность [1]. При изучении влияния различных факторов на неспецифическую активность CRISPR/Cas9 имеется ряд серьёзных ограничений, и прежде всего это отсутствие достаточного количества однородных исследований на больших выборках для изучения каждого из факторов в отдельности. Необходима разработка *in vivo* моделей, позволяющих проводить широкомасштабные статистически достоверные исследования по изучению частот специфического и неспецифического мутагенеза.

Хорошим объектом при разработке таких моделей являются дрожжи *Saccharomyces cerevisiae*. Для них разработаны методы генной инженерии и молекулярной биологии, наличие селективных маркеров положительной и отрицательной селекции позволяет проводить быстрый нетрудоёмкий отбор большого числа клеток [2].

Целью нашей работы является разработка дрожжевой *in vivo* модели для изучения влияния нуклеотидной последовательности РАМ (protospacer adjacent motif) и направляющего участка гидовой РНК (gRNA) на специфическую и неспецифическую мутагенную активность Cas9.

Для решения задачи по изучению влияния последовательности РАМ на активность CRISPR/Cas9 на основе штамма LAN201 методом сайт-специфического мутагенеза получено 4 изогенных штамма, отличающихся между собой локусом РАМ (AGG, TGG, CGG, GGG) в хромосомной копии гена URA3. По выживаемости трансформантов плазмидой с Cas9 и частоте клонов *ura⁻* можно оценить влияние каждого варианта РАМ на эффективность узнавания таргетной последовательности комплексом gRNA/Cas9.

Для решения второй задачи, на основе плазмидного вектора pML107 сконструирована серия из 20 направляющих РНК с заменами в каждой из 20-ти позиций. Для каждого варианта будет произведена оценка выживаемости и частоты клонов *ura⁻*.

1. Alkan, F.; Wenzel, A.; Anthon, C.; Havgaard, J.H.; Gorodkin, J. CRISPR-Cas9 off-targeting assessment with nucleic acid duplex energy parameters. *Genome Biol.* **2018**, 19, 1–13/
2. Stepchenkova, E.I.; Zadorsky, S.P.; Shumega, A.R.; Aksenova, A.Y. Practical Approaches for the Yeast *Saccharomyces cerevisiae* Genome Modification. *Int. J. Mol. Sci.* **2023**, 24, 11960.

Исследование фрактальной структуры ветвей ели методом численного Фурье-анализа***О.Д. Шнырков^{1,2}, Е.Г. Яшина^{1,2}, К.А. Пшеничный¹, С.В. Григорьев^{1,2}***

E-mail: oleg.shnyrkov@mail.ru

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

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что измерение их привычными нам мерами (длина, площадь, объём) дает разные результаты в зависимости от выбора мерного отрезка. Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. При помощи моделирования экспериментов по малоугловому рассеянию света с помощью численного преобразования Фурье была разработана классификация фрактальных и нефрактальных объектов в двумерном пространстве [2]. Логарифмические фракталы – класс фракталов, представители которого имеют иерархическую ветвящуюся структуру и подчиняются закону равенства площади на разных уровнях их иерархии. Этот класс представляет особый интерес, так как часто объекты живой природы развиваются по принципу логарифмического фрактала. Например, боковая проекция взрослого листовного дерева является логарифмическим фракталом [3]. Теоретические попытки описать фрактальную структуру ели, как одномерного объекта, фрактальная размерность которого определяется из зависимости изменения суммарной длины веток от изменения масштаба требуют экспериментального подтверждения [4].

Мы использовали метод численного Фурье-анализа для изучения фрактальной структуры ели. Было предположено, что фрактальной структурой обладают отдельные ветви. Изучены изображения еловых лап взрослого дерева длиной более 20 метров на различной высоте дерева. Фурье образы различных лап, сфотографированных в разных проекциях, демонстрируют идентичную степенную зависимость спектральной интенсивности $I(q)=Aq^{\nu}$, где $\nu = 2$ в диапазоне переданных импульсов от 0.01 до 1 см⁻¹. Во-первых, степенной закон характеризует масштабную инвариантность структуры объекта исследования, то есть объект является самоподобным на разных масштабах. Во-вторых, такой степенной закон характеризует ветвящуюся структуру в диапазоне размеров от 3 до 300 см, описываемую логарифмическим фракталом в двумерном пространстве. Поскольку лапы ели покрыты иголками, с характерным размером в 1 см, то на зависимости спектральной интенсивности $I(q)$ можно обнаружить отчетливую особенность. Позиция этого максимума может служить дополнительным калибратором шкалы переданных импульсов. Показано, что поскольку лапы ели формируются, подчиняясь закону логарифмического фрактала в двумерном пространстве, то выполняется правило, сохранения площади ветвей до и после ветвления: применяемым к произведению диаметра d и длины l ветвей: $d_i l_i = n d_{i+1} l_{i+1}$, где d_i - диаметр ветви и l_i длина ветви, k - количество ветвей дочерней генерации. По всей видимости, многочисленные иголки играют заметную роль в структуре ветви, как логарифмического фрактала, являясь ее неотъемлемой частью. Модельное представление ветви, соответствующее описываемому эксперименту и подчиняющееся закону логарифмического фрактала, является предметом будущих публикаций.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 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.
4. А.И. Гурцев, Ю.Л. Цельникер, Сибирский экологический журнал, 4, (1999) 431-441. - Фрактальная структура ветви дерева.

Динамика изменения кортизола под влиянием синтетического аналога кисспептина¹ у рыб *Danio rerio*

А.А. Нужнова^{1,2}, М.И. Костина^{1,2}, А.А. Блаженко^{2,3}

E-mail: lin.panaiotis@yandex.ru

¹СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

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

³ФГБНУ «НИИ акушерства, гинекологии и репродуктологии Д.О. Отта», Санкт-Петербург, Россия;

Кисспептин является основным модулятором гипоталамо-гипофизарно-гонадной оси (ГГГ) [1]: он управляет высвобождением гонадолиберина и таким образом регулирует ритмичную секрецию ЛГ и ФСГ. Если взаимодействие кисспептина с ГГГ активно исследуется, то взаимодействие кисспептина с реципроктным партнером ГГГ [2] – гипоталамо-гипофизарно-надпочечниковой осью (ГГН) - изучено мало.

Наше исследование направлено на изучение динамики в уровне кортизола при интрацеребральном введении аналога кисспептина¹ у рыб *Danio rerio*. Мы также рассмотрели маркеры перекисного окисления липидов как биохимического ответа на введение кисспептина.

Рыб делили на 6 групп: экспериментальным группам вводили модифицированный кисспептин в концентрации 1 и 4 мкг/мл и оставляли на 1 и 4 часа. Двум контрольным группам вводили раствор 0,9% раствор хлорида натрия и выводили их эксперимента через 1 и 4 часа соответственно. В качестве неспецифического ответа на введение препарата оценивали интенсивность перекисного окисления липидов. Об интенсивности перекисного окисления липидов судили по концентрации малонового диальдегида (МДА) в ткани хвоста.

У рыб групп кисспептин 1ч1мкг/мл и 1ч4мкг/мл наблюдали повышенный уровень кортизола в сравнении с контролем. Также мы обнаружили, что у групп, которым вводили кисспептин в концентрациях 1 мкг/мл и 4 мкг/мл, секреция кортизола возросла относительно контроля без учета временного фактора.

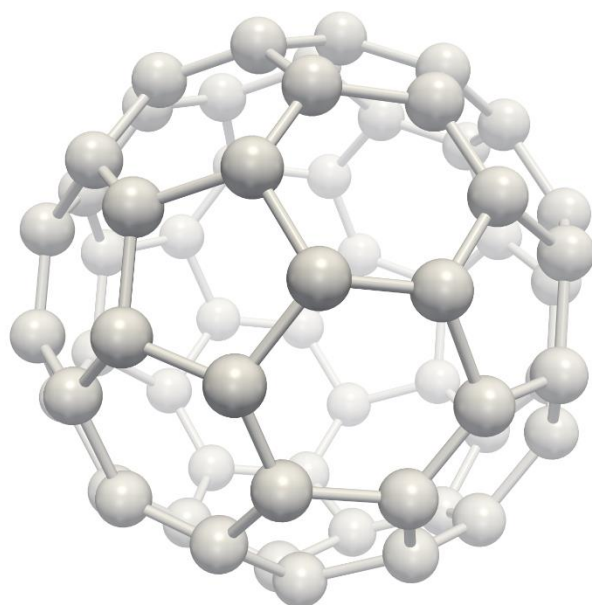
Уровень МДА оказался ниже у групп, которым вводили 1 мкг/мл кисспептина, чем у групп, которым вводили физраствор. У опытных групп, которых после введения оставляли на 1 час (кисспептин 1ч1мкг/мл и кисспептин 1ч4мкг/мл), зафиксировали значительно сниженную концентрацию МДА в сравнении с группой контроля. Группы кисспептин 4ч1мкг и 4ч4мкг, наоборот, демонстрировали повышенное количество МДА относительно группы, которой вводили физраствор.

Таким образом, введение синтетического аналога кисспептина¹ в концентрации 1мкг/мл и 4 мкг/мл приводят к увеличению уровня гормона стресса вне зависимости от времени покоя. В течение 1 часа после инъекции секреция кортизола наиболее интенсивна. При этом в целом концентрация 1мкг/мл кисспептина способствует уменьшению интенсивности перекисного окисления липидов. Покой в течение 1 часа также приводит к снижению процессов перекисного окисления липидов, однако покой в течение 4 часов – к повышению.

Авторы выражают благодарность Хохлову Платону Платоновичу и Карпенко Марине Николаевне

1. Padda J et al. Role of Kisspeptin on Hypothalamic-Pituitary-Gonadal Pathology and Its Effect on Reproduction // Cureus. 2021. V. 13. No. 8. P. e17600.
2. Toufexis D. et al. Stress and the Reproductive Axis // J Neuroendocrinol. 2014. V. 26. No. 9. P. 573–586.

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ



Полупроводниковые материалы для создания перспективной отечественной компонентной базы: металлоорганические материалы**Ю.Ю. Бунькова^{1,2}**

E-mail: yu.bunkova@rtc.ru

¹ГНЦ РФ Центральный научно-исследовательский институт робототехники и технической кибернетики, Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Металлоорганические материалы представляют собой химические соединения, состоящие из катионов или кластеров металлов и органических лиганд. Данные материалы применяются при производстве ряда изделий электроники и представляют особый интерес из-за их доступности, низкой стоимости изготовления и малой токсичности. Более того, простой синтез металлоорганических соединений делает доступным широкий выбор лиганд, что позволяет изменять свойства материалов [1]. Исследования металлоорганического соединения $[(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2]\text{Tb}_2(\text{C}_6\text{Cl}_2\text{O}_4^{2-})_3(\text{DMF})_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{HCOO})$ (SCU-12) показали, что материал является перспективным при разработках и создании детекторов для радиационного мониторинга в составе измерительной аппаратуры. Согласно измерениям ВАХ, сопротивление планарного детектора на основе SCU-12 составляет $1,6 \cdot 10^{11}$ Ом·см, а темновые токи лежат в пределах 10^{-12} - 10^{-9} А, что сопоставимо с существующими детекторами на основе CdZnTe и TlBr. Минимальная детектируемая доза составляет $0,705$ мкГр с⁻¹, что является рекордным значением среди всех детекторов на основе поликристаллических материалов [2].

Металлоорганическое соединение $\text{UO}_2(\text{SC}_6\text{H}_4\text{COO})_2(\text{DMF})$ (SCU-15) может быть использовано для рентгеновской визуализации [3]. Преимуществом SCU-15 являются небольшие размеры – на основе кристалла размером 3 мм удалось создать планарный пиксельный детектор 2x3. Уменьшение толщины SCU-15 позволяет достичь наибольшего поглощения рентгеновского излучения, что благоприятно сказывается на эффективности переноса носителей заряда и повышении точности детектора [3]. Преимуществами металлоорганических соединений является их простой синтез и высокая чувствительность к рентгеновскому излучению при небольших размерах детекторов на их основе. Кроме того, производство металлоорганических материалов легко автоматизировать [4]. Материалы могут быть использованы при производстве полупроводниковых детекторов рентгеновского излучения, детекторов химических элементов, лазеров, светодиодов [5].

Результаты получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России FNRG-2023-0001 1022113000016-5-2.5.1 № 075-03-2023-193/2 «Исследование влияния нейтронного излучения на свойства полупроводниковых материалов»

1. Тютюник А.С. Фотоэлектрические свойства новых металлоорганических цинковых комплексов / А.С. Тютюник, В.С. Гурченко, А.С. Мазинов // Физико-химические проблемы возобновляемой энергетики: сборник трудов российской конференции. – Санкт-Петербург : Политех-пресс, 22–24 ноября 2021 г. – С. 91-92.
2. Wang Y. Direct Radiation Detection by a Semiconductive Metal–Organic Framework / Y. Wang, X. Liu, F. Zhai // Journal of the American Chemical Society. – 2019. – V. 141, № 20. – P. 8030-8034.
3. Cheng L. Millimeter-scale semiconductive metal-organic framework single crystal for X-ray imaging // L. Cheng, C. Liang, B. Li [et al.] // Cell Reports Physical Science : электронный журнал. – URL: [https://www.cell.com/cell-reports-physical-science/fulltext/S2666-3864\(22\)00295-8](https://www.cell.com/cell-reports-physical-science/fulltext/S2666-3864(22)00295-8). – Дата публикации: 17.08.2022.
4. Правилова А.Г. Металлоорганические соединения / А.Г. Правилова // Научные достижения: теория, методология, практика. Сборник научных трудов по материалам XXX Международной научно-практической конференции (г.-к. Анапа, 28 апреля 2021 г.). – Анапа: Изд-во «НИЦ ЭСП» в ЮФО, 2021. – С. 42-45.
5. Zhichao H. Luminescent metal–organic frameworks for chemical sensing and explosive detection / H. Zhichao, B.J. Deibert, J. Li // Chemical Society Review. – 2014. – V. 43, № 16. – P. 5815-5840.

Полиольный синтез коллоидных кобальтосодержащих нанокompозитов в среде сверхразветвлённых полимеров

А.Е. Бурматова, А.А. Ханнанов, А.С. Гороя, М.П. Кутырева

E-mail: nastyaburmatova15@gmail.com

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Разработка эффективных и экономичных подходов к синтезу коллоидно-устойчивых наноструктурированных материалов, содержащих магнитоактивные металлы, в настоящее время является как фундаментальным, так и практически значимым междисциплинарным направлением. Полиольный метод (polyol process) является одним из успешных подходов к одностадийному получению перспективных материалов с включёнными наночастицами металлов [1]. При этом, морфология и функциональные свойства получаемого материала в большой степени зависят от природы полиола, соотношения компонентов и условий синтеза.

Разработан способ синтеза кобальтосодержащего нанокompозита в организующей и восстанавливающей среде сверхразветвлённых полиэфирополиолов третьей (G3-ОН) и четвертой (G4-ОН) [2] генераций. Успешный синтез нанофазы кобальта в матрице полиола достигается при температуре 220 °С. Добавление NaOH позволяет повысить выход и понизить температуру синтеза до 170 °С. Изучены условия формирования металлической нанофазы при различных соотношениях $v_{\text{Co(II)}}/v_{\text{OHpolyester polyol}} = 1:500, 1:250, 1:150, 1:100$. Установлено, что восстановительная способность G4-ОН и G3-ОН ограничивается соотношением $v_{\text{Co(II)}}/v_{\text{OHpolyester polyol}} = 1:150$. На основе G4-ОН были получены коллоидно-устойчивые нанокompозиты коричневого цвета для соотношения 1:500 (CoNp-1), зелёного - для 1:250 (CoNp-2) и темно-зелёного - для 1:150 (CoNp-3). В случае синтеза в среде G3-ОН были получены коллоидно-устойчивые наносистемы коричневого цвета для соотношения 1:500 (CoNp-4), зелёного - для 1:250 (CoNp-5) и двухфазная система - для соотношения 1:150 (CoNp-6). Методом ИК спектроскопии диффузного отражения установлено, что в присутствии ионов Co(II) окисление OH-групп полиола для G4-ОН начинается при 90 °С, а для G3-ОН - при 100 °С. Окисление сопровождается образованием периферических альдегидных групп и карбоксильных групп для G4-ОН и G3-ОН соответственно.

Состав, функциональные свойства и морфологию наноматериалов определяли с помощью ИК-Фурье и УФ-Вид спектроскопии, РФА, ТГ-ДСК, NTA (Nanoparticle tracking analysis). Данные NTA в системе ДМСО/Н₂О показали, что все системы характеризуются образованием монодисперсных агрегатов. Увеличение содержания ионов Co (II) в синтезе приводит к уменьшению гидродинамического диаметра агрегатов в случае G4-ОН: 147 нм (CoNp-1), 77 нм (CoNp-2), 66 нм (CoNp-3). В условиях синтеза в среде G3-ОН гидродинамический диаметр агрегатов, наоборот, увеличивается: 74 нм (CoNp-4), 79 нм (CoNp-5), 103 нм (CoNp-6). По данным ПЭМ наноматериалы CoNp-1, 2, 3 содержат сфероидные полимерные агрегаты диаметром 45±20 нм с иммобилизованными наночастицами кобальта размером 5±3 нм. Для образцов CoNp-4, 5 характерно образование металлополимерных кластеров с диаметром 30±20 нм. Нанокompозит CoNp-6 представляет собой полимериммобилизованные кластерные частицы диаметром 4±3 нм. Тестированием *in vitro* показано, что все синтезированные наноматериалы обладают высокой гемосовместимостью (НС₅₀ > 6 мг/мл для G4-ОН и НС₅₀ > 4 мг/мл для G3-ОН) и являются синтетическими модуляторами протеиназной активности фермента ренин *Aspergillus niger*.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10036, <https://rscf.ru/project/22-73-10036/>. Исследование морфологии нанокompозитов выполнено на оборудовании Междисциплинарного центра "Аналитическая микроскопия" КФУ.

1. Fiévet, F. et al. The Polyol Process // *Nanomaterials: A Danger or a Promise?* 2012. P. 1-25.
2. Burmatova, A. et al. A hyperbranched polyol process for designing and manufacturing nontoxic cobalt nanocomposite // *Polymers*. 2023. V. 15. No. 15. Reg. 3248.

Влияние технологических факторов аргонодуговой сварки на свойства сварных соединений стали аустенитного класса

Л.А. Гуменюк¹, В.С. Скутин¹

E-mail: Gumenyuk@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время при изготовлении и монтаже оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок с жидкометаллическим теплоносителем широко используются электроды марки А-1 для выполнения сварных соединений из нестабилизированных аустенитных коррозионностойких сталей. За рубежом для сварки тех же сталей широко применяются автоматические и полуавтоматические дуговые способы сварки с использованием порошковых сварочных проволок, что дает реальные преимущества в виде большей производительности и обеспечения высокого качества сварных соединений, особенно в монтажных условиях. Учитывая повышенную температуру эксплуатации в 550 °С, металл шва должен обеспечивать содержание ферритной фазы в пределах 2-5 % [1].

С целью повышения эффективности сварочных работ при обеспечении качества выполнения сварных соединений стали марок 08X18H9 и 08X16H11M3 в ЦНИИ КМ «Прометей» разработана аустенитная порошковая сварочная проволока марки ПП-А316/1 (композиции 04X17H10M2) для аргонодуговой сварки плавящимся электродом.

В связи с тем, что в отечественной практике сооружения объектов использования атомной энергии (ОИАЭ) отсутствует опыт использования порошковых сварочных проволок при сварке аустенитных коррозионностойких сталей, следующий этап работы включал комплексную разработку технологии аргонодуговой сварки плавящимся электродом с использованием сварочной проволоки марки ПП-А316/1.

В результате выполненных работ проведена оценка влияния процентного состава защитной смеси Ar+CO₂, а также различных вариантов нарушения подачи защитного газа, на качество формирования сварочных валиков. Кроме того, исследовано влияние состава защитной смеси на стабильность процесса сварки, на химический состав наплавленного металла и его стойкость против межкристаллитной коррозии.

Исследовано влияние технологических параметров сварки на качество и геометрические характеристики сварочных валиков, с учетом полученных результатов выполнены сварные пробы из листового проката стали марки 08X16H11M3. Из сварных проб изготавливались макрошлифы для оценки качества выполнения сварных соединений и образцы для оценки механических свойств. На основании анализа макроструктуры сварных соединений выбраны оптимальные технологические параметры сварки. Результаты испытаний металла шва на статическое растяжение показали, что механические свойства обеспечиваются на уровне требований [2] к металлу шва (наплавленному металлу).

Порошковая проволока марки ПП-А316/1 и выбранные параметры аргонодуговой сварки плавящимся электродом позволяют обеспечить требуемое качество сварных соединений, а также механические свойства, удовлетворяющие требованиям действующей нормативной документации для ОИАЭ.

1. НП-105-18 «Правила контроля металла оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок при изготовлении и монтаже».
2. РД 5.УЕИА.2430-2007 «Сварные соединения оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок с реакторами на быстрых нейтронах. Механические свойства, химический состав металла шва (наплавленного металла) и сварных соединений».

Конечно-элементный анализ трещиностойкости керамических композитов***Е.В. Игнатьева^{1,2}, С.А. Красницкий¹⁻³, А.Г. Шейнерман^{2,4}, М.Ю. Гуткин²⁻⁴***

E-mail: elena220599@yandex.ru

¹*Проектно-изыскательский центр г. Санкт-Петербург АО КИС «Исток», Санкт-Петербург, Россия*²*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*³*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*⁴*Институт проблем машиноведения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия*

Композитные нанокерамики с графеновым наполнителем находят широкое применение в энергетике и энергетическом машиностроении, в первую очередь благодаря высокой электропроводности [1]. В то же время добавление графенового наполнителя может негативно сказываться на трещиностойкости таких материалов [2-3]. По всей видимости, это связано с присутствием трещиноподобных дефектов, образующихся на межфазных границах в процессе спекания или под действием внешних нагрузок. Анализ устойчивости таких трещин позволит в дальнейшем улучшить надежность композитов типа «керамика-графен».

В работе представлен конечно-элементный анализ возможных сценариев разрушения композитных керамик, содержащих пластинчатые включения, за счет образования трещин отрыва, расположенных в керамической матрице, в пластинчатом включении и на их межфазной границе. Для каждого сценария разрушения определены зависимости трещиноподвижущих сил (скорости выделения энергии при росте трещины) от размеров включения и упругих свойств материалов. Показано, что в случае относительно «жестких» включений распространение трещин предпочтительнее в матрице. Напротив, в случае относительно «мягких» включений распространение трещин ожидается внутри включения и на межфазных границах. Если длина трещины много больше размера включения, то трещиноподвижущая сила стремится к некоторому постоянному значению. Если длина трещины много меньше размера включения, то трещиноподвижущая сила стремится к нулю. Кроме того, для каждой конфигурации дефектов определены упругие модули включения и матрицы, размеры трещины и включения, при которых трещиноподвижущие силы достигают наибольших значений.

Результаты работы опубликованы в статье [5].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 18-19-00255, <https://rscf.ru/en/project/21-19-28039/>)

1. Huang Y, Wan C. Controllable fabrication and multifunctional applications of graphene/ceramic composites // *Journal of Advanced Ceramics*. 2020. No. 9. P. 271-291.
2. Sheinerman AG, Gutkin MYu. Strengthening and softening of nanoceramics: A brief review // *Reviews on Advanced Materials and Technologies*. 2019. No. 1(1). P. 46-53.
3. Sheinerman AG, Gutkin MYu. The role of grain boundaries and their triple junctions in strengthening and softening of nanocrystalline ceramics // *Letters on Materials*. 2020. No. 10(4s). P. 547-550.
4. Sheinerman AG, Morozov NF, Gutkin MYu. Effect of grain boundary sliding on fracture toughness of ceramic/graphene composites // *Mechanics of Materials*. 2019. No. 137. P. 103-126.
5. Ignateva EV, Krasnitckii SA, Sheinerman AG, Gutkin MYu. The finite element analysis of crack tolerance in composite ceramics // *Materials Physics and Mechanics*. 2023. Vol. 51. No. 2. P. 21-26.

**Применение методов статистического анализа к исследованию соотношения
«химический состав- микроструктура»**

Р.А. Махилев¹, Т.А. Екимова¹

E-mail: makhilev84@mail.ru

¹*Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия*

Современные промышленные технологии позволяют управлять сложными технологическими процессами, но не позволяют прогнозировать качество готовой продукции, а также вносить изменения (корректировать) параметры, которые влияют на качество изделий, в процессе изготовления последних [1]. В литейном производстве существует проблема наличия в отливках чугуна включений фосфидной эвтектики, которая существенно ухудшает механические свойства готовых изделий. Исследование влияния контролируемых в технологическом процессе параметров, а именно химического состава, на величину площади фосфидной эвтектики является актуальной задачей. Установление данных соотношений между химическим составом и микроструктурой отливки позволит построить модели, предсказывающие появление брака еще на этапе изготовления и, как следствие, предотвратить отбраковку изделий.

Целью работы является исследование влияния химического состава на площадь включений фосфидной эвтектики в отливках из чугуна марки АХНМ – Д. Исследование было проведено на примере отливок «втулка цилиндра» из чугуна марки АХНМ – Д. Для установления соотношений «химический состав- микроструктура» применялись методы корреляционного статистического анализа. Кроме исследования влияния химического состава на микроструктуру отливок было проанализировано влияние внешних условий: термовременной обработки в конце процесса плавки, термовременной обработки в начале процесса плавки, температуры выпуска металла из печи, температуры заливки, содержания модификатора и времени модификации. Для каждого анализируемого параметра были рассчитаны среднее, максимальное и минимальное значения, дисперсия, среднеквадратичное отклонение и коэффициент вариации.

По полученным результатам было показано, что процентное содержание хрома оказывает наиболее сильное влияние на увеличение площадей включений фосфидной эвтектики, в то время как сера наоборот, с ростом ее процентного содержания площадь фосфидной эвтектики значительно снижается. Однако содержание серы для чугунов более 0,05 % недопустимо, соответственно уменьшать площадь фосфидной эвтектики увеличивая содержание серы не приемлемо. Так же на увеличение площадей включений фосфидной эвтектики сильное влияние оказывают фосфор и углерод. Допустимым содержанием углерода в чугуне марки АХНМ-Д является значение от 2,9 до 3,1 %, тогда как в исследуемых образцах содержание углерода варьировалось в диапазоне 3,08-3,15%. Можно говорить о том, что приемлемым будет оказывать влияние на площадь фосфидной эвтектики путем уменьшения содержания углерода.

Исследование, описанные в данной работе, были проведены в рамках реализации Программы поддержки НИОКР студентов, аспирантов и лиц, имеющих ученую степень, финансируемой Правительством Республики Карелия

1. Mishra N, Rane, S.B. //Int. Journal of Lean Six Sigma (2019) — Т. 10— №1.
2. ГОСТ 3443-87 Отливки из чугуна с различной формой графита. Методы определения структуры. Марки. — М.: ИПК Издательство стандартов, 2005 год.

Применение наностержней оксида цинка, синтезированных модификацией гидротермального метода, в качестве активного слоя импедиметрического биосенсора для обнаружения антител

Е.Н. Марценюк¹, Н.О. Ситков¹, А.А. Рябко²

E-mail: elizavetamars171@gmail.com

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

² Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), Санкт-Петербург, Россия

Импедиметрические биосенсоры являются одним из популярных биосенсоров для обнаружения широкого спектра аналитов. Развитие и совершенствование данного принципа детектирования является актуальной задачей для разработки новых типов аналитических устройств для биомолекулярной диагностики заболеваний. В отличие от других электрохимических датчиков, импедиметрические датчики менее требовательны к качеству электродов. Они обладают достаточно высокой химической стабильностью в различных средах и способны работать с непрозрачными образцами, в отличие от большинства оптических биосенсоров. Особый интерес представляют биосенсоры с очень высокой чувствительностью, способные обнаруживать малые количества биологических маркеров заболеваний [1]. Чувствительность импедиметрических биосенсоров может быть повышена с помощью модификации их электродов наноструктурированными материалами, в частности оксидом цинка [2].

В данной работе представлен миниатюрный биосенсор с массивом наностержней оксида цинка (ZnO), синтезированных на подложке с встречно-штыревыми электродами с помощью низкотемпературного гидротермального синтеза. В результате сформировано равномерное покрытие из наностержней ZnO длиной ~1 мкм и диаметром не более 50 нм. На полученной структуре иммобилизовали белок А, который предварительно тестировали на связывание с омализумабом методом капиллярного электрофореза. Для иммобилизации белка А наностержни ZnO последовательно обрабатывали с помощью (3-аминопропил) триметоксисилана (АПТМС) и м-малеимидобензоил-N-гидроксисукцинимидного эфира (MBS). В качестве визуального контроля эффективность иммобилизации белка А на наностержнях оксида цинка использовали метод связывания антител, меченных пероксидазой хрена. С помощью импедансной спектроскопии удалось обнаружить связывание омализумаба в концентрациях до 5 пг/мл. Импедансные измерения проводились в диапазоне частот от 1 Гц до 500 кГц, с амплитудой напряжения 100 мВ и без применения дополнительного смещения постоянного тока. По результатам измерений определен диапазон частот от 7 до 50 кГц, где наблюдалось линейное изменение импеданса в ответ на изменение концентрации аналита. Полученные структуры пригодны для создания биосенсорных систем многократного использования, поскольку электроды с покрытием ZnO легко очищаются путем фотокаталитического разложения связанных молекул.

Разработанный биосенсор обладает перспективой для использования в системах Point-of-Care, предназначенных для быстрого мультимодального обнаружения молекулярных маркеров широкого спектра заболеваний.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-01136)

1. Sitkov N. et al. Toward development of a label-free detection technique for microfluidic fluorometric peptide-based biosensor systems //Micromachines. 2021. V. 12. No. 6. P. 691.
2. Ryabko A. A. et al. Two-stage synthesis of structured microsystems based on zinc-oxide nanorods by ultrasonic spray pyrolysis and the low-temperature hydrothermal method //Semiconductors. 2020. V. 54. P. 1496–1502.

Влияние внешних параметров на механические характеристики высокопрочного чугуна марки ВЧ50

М.А. Мохов¹, Т.А. Екимова¹

E-mail: mikhail.mokhov.01@gmail.com

¹*Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия*

Предупреждение брака на литейном производстве является одной из важных задач. При этом в процессе производства отливок скорректировать можно только химический состав, тогда как на механические свойства конечного изделия влияет множество факторов. Использование предсказательной аналитики позволит уменьшить количество брака на производстве. Для построения моделей, на основе нечеткой логики или искусственного интеллекта необходимо изучить влияние различных факторов, от которых могут зависеть механические свойства отливок. Систематизация этих данных и определение закономерностей «внешние условия-механические свойства» позволит оптимизировать производство и снизить количество брака.

В данной работе исследовалось влияние качества формовочной смеси на прочностные характеристики чугунов марки ВЧ50. Поставленная задача решалась с применением методов статистического анализа данных об изделиях блок и подвеска, отлитых из чугуна марки ВЧ50. В работе была проведена оценка качества формовочной смеси и влияние прочности смеси на механические свойства отливок.

По полученным результатам показано, что основными параметрами, влияющими на прочность формовочной смеси, является количество и качество регенерата. Наиболее оптимальным с точки зрения соотношения экономической выгоды и прочностных свойств является формовочная смесь, состоящая из 70% регенерата и 30% формовочного песка.

Также в работе была выполнена оценка влияния прочностных свойств формовочного песка на механические свойства изделий из чугуна марки ВЧ50. Показано, что:

- блоки имеют большие значения прочности при растяжении, твердости, условного предела текучести. Подвески имеют больший коэффициент относительного сужения после разрыва;
- прочность формовочной смеси линейно влияет на предел прочности при растяжении ВЧ50, твердость ВЧ50, относительное сужение после разрыва ВЧ50, относительное удлинение после разрыва ВЧ50;
- условный предел текучести зависит нелинейно от прочности формовочной смеси.

1. ГОСТ 7293-85 Чугун с шаровидным графитом для отливок. Марки. — М.: ИПК Издательство стандартов, 2004 год.
2. Лекционный курс по дисциплине "Материаловедение" [Электронный ресурс]/ Галаганов Сергей Николаевич/ URL: - <https://multiurok.ru/index.php/files/liektsionnyi-kurs-po-distiplinie-materialoviedie.html> Яз. Рус.

Влияние технологии изготовления высокопрочной стали для судостроения на особенности формирования структуры

В.Р. Никитина¹, С.В. Коротовская¹, Э. А. Ушанова¹

E-mail: npr@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время для строительства судов и грузоподъемной техники, эксплуатирующейся в условиях севера, используют стали марок типа 17ХГН2МФБТ, 18ГНМФТР с содержанием углерода 0,16-0,20% после закалки с отпуском или закалки с прокатного нагрева с отпуском. Несмотря на высокие прочностные свойства, они обладают недостаточно хорошей свариваемостью вследствие высокого содержания углерода и низкой ударной вязкостью при отрицательных температурах.

Известно, что после закалки с прокатного нагрева и отпуска в низкоуглеродистых сталях удастся добиться высокого уровня прочностных свойств за счет повышения плотности дислокаций и создания субзеренной структуры в аустените при горячей пластической деформации с границами деформационного происхождения, которая наследуется конечной структурой после фазового превращения при охлаждении [1, 2].

Целью работы являлось обеспечение прочностных характеристик (σ_B - не менее 1100 МПа) и высокого уровня ударной вязкости при температурах до минус 20 °С за счет создания однородной (по размеру и морфологии) структуры в стали мартенситного класса марки 12ХН5МДФ.

В рамках работы была выполнена опытная прокатка листов толщиной 15 мм на стане «Кварто-800» с последующей закалкой с печного нагрева с высокотемпературным отпуском. Проведены испытания на ударный изгиб (по ГОСТ 9454 на образцах типа 11 при температурах испытания 0 и минус 20 °С), исследована микротвердость этих образцов с помощью цифрового микротвердомера DM8 при нагрузке 0,1 кгс. С помощью дилатометра DIL-805 на цилиндрических образцах Ø5x10 мм было выполнено моделирование горячей прокатки с закалкой и отпуском, закалки с прокатного нагрева с отпуском и закалки с прокатного нагрева с последующей закалкой с отпуском. Исследования структуры выполнялись с помощью оптического микроскопа «Axiovert 40 MAT» и растрового электронного микроскопа «TESCAN LYRA3».

Проведенные исследования показали, что дополнительная закалка с высоким отпуском 600 °С после закалки с прокатного нагрева способствует повышению морфологической однородности структуры за счет повторной перекристаллизации, что обеспечивает уменьшение размера зерна аустенита (с 19,6 до 11 мкм) и конечной структуры (с размером структурного элемента при заданном угле толерантности 5 ° не более 5 мкм) перед превращением. При этом сохраняются преимущества закалки с прокатного нагрева (высокий уровень микротвердости за счет повышения плотности дислокаций и создания субзеренной структуры), высокая дисперсность структуры обеспечит и высокую хладостойкость.

По результатам исследования сделан вывод, что формирование квазиоднородной мелкодисперсной бейнитно-мартенситной структуры позволит получить в исследованной стали марки 12ХН5МДФ высокий уровень хладостойкости и работоспособности, который необходим для сталей, применяемых в условиях Крайнего севера и арктического шельфа.

1. Olasolo M., Uranga P., Rodriguez-Ibabe J.M., Lypez B. Effect of austenite microstructure and cooling rate on transformation characteristics in a low carbon Nb–V microalloyed steel// Materials Science and Engineering A – 2011. -528 (2011) — P. 2559–2569.
2. Золоторевский Н.Ю., Зисман А.А., Панпурин С.Н., Титовец Ю.Ф., Голосиенко С.А., Хлусова Е.И. Влияние размера зерна и деформационной субструктуры аустенита на кристаллогеометрические особенности бейнита и мартенсита низкоуглеродистых сталей // МиТОМ. – 2013. - № 10 (700). – С. 39-48.

Синтез наночастиц платины на носителе из восстановленного оксида графена

А.В. Прыткова, В.В. Брусьюко, А.М. Димиев

E-mail: AnVSvalova@kpfu.ru

¹*Казанский Федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, г. Казань, Россия*

Такой благородный металл, как платина привлекает большое внимание исследователей благодаря своим хорошим каталитическим свойствам. Однако использование платинового катализатора в нефтехимии, в органическом синтезе, в реакциях топливных элементов и во многих других областях химии ограничено ввиду высокой стоимости благородного металла [1]. Снижение стоимости каталитической системы можно добиться путём уменьшения частиц до нанометровых размеров и создания углеродной подложки с большой площадью поверхности. [2]. Оксид графена – двумерный углеродный материал обладает огромным количеством кислородных функциональных групп, которые могут выполнять функцию связывания каталитических центров с носителем. В ходе его термической обработки образуется графеноподобный материал, который отличается от исходного прекурсора содержанием кислородных функциональных групп и большим количеством дефектов углеродной сетки. Последние также становятся местами зародышеобразования наночастиц.

Целью данной работы стал синтез наночастиц платины на носителе из восстановленного оксида графена, а также исследования структуры и морфологии полученных материалов с помощью физических методов исследования.

Согласно результатам, СЭМ и ПЭМ анализа оксид графена в ходе термической обработки сохраняет свою двумерную структуру. Проведение синтеза при температуре 80°C с использованием моноэтаноламина в качестве растворителя для гексахлороплатината (IV) калия привело к образованию наночастиц платины с размерами от 7 до 12 нм. Изменение температуры синтеза до 180°C привело к слипанию платиновых наночастиц и, как следствие, к образованию агломератов шарообразной формы с размерами примерно от 100 нм до 135 нм. При этом полученные агломераты были распределены по поверхности восстановленного оксида графена равномерно. Использование нитрата серебра позволило получить при нагревании промежуточный реагент - нитрат платины (IV) для синтеза платинового композита при температуре 180°C. В итоге, были получены хорошо диспергированные по поверхности носителя из восстановленного оксида графена платиновые наночастицы, размер которых крайне трудно определить из-за их слипания в мелкие агломераты с размерами до 75 нм.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 21-73-20024

1. Himanshu, S. Catalysis by substituted platinum (ionic Pt) catalysts / H. Sharma, A. Bisht, N. Sethulakshmi, S. Sharma // International Journal of Hydrogen Energy. 2023. doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.08.343
2. Gerber, I. A. A Theory/Experience Description of Support Effects in Carbon-Supported Catalysts / I. A. Gerber, P. Serp // Chemical Review. 2020. P. 1250 – 1349. doi: 10.1021/acs.chemrev.9b00209

Исследование влияния гамма-лучей на механизм дефектообразования нанокристаллов диборида циркония

С.Ф. Самедов^{1,2}, А.А. Сидорин¹, А.С. Орлов¹, О.А. Самедов², Н.М. Мехтиева², М.Н. Мирзаев^{1,2}

E-mail: Samirsamedov.rpi@gmail.com

¹Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия

²Институт Радиационных Проблем Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики, Баку, Азербайджан

В данной работе изучено влияние гамма-квантов (2350 кГр и 4700 кГр) на механизм дефектообразования нанокристаллов ZrB_2 чистотой 99,5%. Исследования проводились в спектроскопии времени жизни аннигиляции позитронов. Полученные результаты представлены в Таблице 1. Обычно спектр времени жизни позитронов в контексте наночастиц демонстрирует три заметных компонента [1]. В исследованиях PALS для нанокристалла ZrB_2 были идентифицированы две компоненты (τ_1 и τ_2). Известно, что каждая составляющая времени жизни соответствует разным типам дефектов и/или масс.

Образец	τ_1 (нс)	τ_2 (нс)	I_1 (%)	I_2 (%)	τ_{mean} (нс)	τ_b (нс)	k_d нс ⁻¹	τ_2/τ_b
ZrB_2 (Исходный)	0.174±2	0.232 ±3	75.5	24.5	0.188	0.185	0.3557	1.254
ZrB_2 (2350 кГр)	0.176±5	0.246± 5	78.8	21.2	0.190	0.187	0.344	1.315
ZrB_2 (4700 кГр)	0.181± 1	0.261±8	84	16	0.193	0.189	0.276	1.38

Увеличение компоненты τ_1 от 0,174±2 нс до 0,181±1 нс в нанокристаллах ZrB_2 , подвергнутых воздействию гамма-лучей, свидетельствует об изменении взаимодействия электронов, вакансий и кластеров, локализованных внутри кристалла, с позитронами и доминировании мелких вакансий в структуре [3]. При этом после воздействия гамма-квантов компонента τ_2 увеличивается (с 0,232 ± 5 нс до 0,261 ± 8 нс), а интенсивность I_2 снижается (с 24,5% до 16%). Увеличение позитронной составляющей периода полураспада в нанокристалле ZrB_2 свидетельствует об увеличении центров захвата позитронов. Для нанокристалла ZrB_2 , подвергнутого воздействию гамма-лучей, с использованием двух моделей захвата были рассчитаны время аннигиляции позитронов в бездефектных областях, скорость захвата в дефекты и отношение свободного объема к геометрии [2]. Скорость аннигиляции позитронов в бездефектных областях увеличивается, а скорость захвата в дефекты уменьшается. Отношение свободного объема к геометрии увеличивается с 1,254 до 1,38 под воздействием гамма-лучей. Границы захвата позитронов для доминирующих дефектных центров внутри кристалла представляют собой протяженные дефекты, характеризующиеся промежутками примерно в один-два атома, расположенными близко друг к другу.

1. Homnath Luitel, A. Sarkar, Mahuya Chakrabarti, S. Chattopadhyay, K. Asokan, D. Sanyal. Positron annihilation lifetime characterization of oxygen ion irradiated rutile TiO₂. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B, 379 (2016), pp. 215-218, 10.1016/j.nimb.2016.04.014.
2. Halyna Klym, Ivan Karbovnyk, Sergei Piskunov, Anatoli I. Popov. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy Insight on Free Volume Conversion of Nanostructured MgAl₂O₄ Ceramics. Nanomaterials 2021, 11(12), 3373; <https://doi.org/10.3390/nano11123373>.
3. Sh.B. Utamuradova, Sh.Kh. Daliev, D.A. Rakhmanov, S.F. Samadov, A.S. Doroshkevich. Investigation of radiation defect formation of irradiated n-Si<Pt>. Advanced Physical Research. 5 (3) (2023) 181-193

Характеристики биметаллических катализаторов (Me)Pd (Me=Cu, Ag)

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

E-mail: sazonova_y@pnpi.nrcki.ru

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

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, Россия

В качестве катализаторов чаще всего используются металлы платиновой группы. Активность катализаторов зависит от природы металла и количества активных центров, которые представляют собой атомы, находящиеся на поверхности катализатора, при этом атомы внутри объема катализатора не участвуют в процессе катализа. Целесообразна замена части каталитически активного металла на более дешевый металл путем синтеза биметаллических наночастиц типа «ядро-оболочка».

Целью данной работы была оценка каталитической активности катализаторов и определение размеров кристаллитов металлов, входящих в их состав, в зависимости от условий синтеза, состава биметаллических наночастиц, где в качестве оболочки выступает Pd.

Наночастицы металлов были получены методом восстановления из растворов («мокрая химия»). Из водного раствора CuSO_4 были получены наночастицы Cu [1], а из спиртового раствора AgNO_3 были получены наночастицы Ag [2], на которые из спиртового раствора PdCl_2 были осаждены наночастицы Pd.

Маркером каталитической активности материала (биметаллических наночастиц) является величина ESA- электрохимически активная площадь поверхности [3]. Максимальное значение ESA каталитического покрытия с наночастицами (Cu)Pd равно $26,4 \text{ м}^2/\text{г}$, а с наночастицами (Ag)Pd – $17,6 \text{ м}^2/\text{г}$. Из соотношения видно, что каталитическая активность биметаллических наночастиц (Cu)Pd выше каталитической активности наночастиц (Ag)Pd.

С целью установления корреляции между каталитической активностью материала на основе биметаллических наночастиц (Cu)Pd и (Ag)Pd и их фазовым составом для всех образцов наночастиц были получены дифрактограммы (Rigaku SmartLab (9кВт, $\text{CuK}\alpha$ и Rigaku SmartLab, (3кВт, $\text{CoK}\alpha\text{CuO}$ и Cu_2O , причем они оказывают положительное влияние на каталитическую активность материала. Размеры кристаллитов металлов, входящих в состав биметаллических наночастиц (Cu)Pd и (Ag)Pd, приведены ниже в таблице.

(hkl)	(Cu)Pd		(Ag)Pd	
	Cu	Pd	Ag	Pd
	D, Å	D, Å	D, Å	D, Å
(111)	541±21	102.6±9	113.2±8	248±2
(200)	305±20	60.9±10	70±9	134±3
(220)	353±23	70.9±10	88.8±17	170±4

- Gawande M. B. et al. Cu and Cu-based nanoparticles: synthesis and applications in catalysis //Chemical reviews. 2016. Т. 116, №. 6. С. 3722-3811.
- Камашев Д.В., Кряжев А.А., Получение нанокомпозитных материалов путем восстановления соединений металлов i группы периодической системы au, ag в пустотах опаловой матрицы //Vestnik of Geosciences. 2022, №1. С. 33-43.

Дизайн редокс-активных полимерных материалов для электрохимических устройств с учетом взаимодействий в системе «полимер – электролитный растворитель»

Е.А. Смирнова, И.А. Чепурная

E-mail: esmirnova@mail.ioffe.ru

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

Электрохимически активные органические и металлоорганические полимеры находят применение в различных энергонакопительных и электронных устройствах, преимущественно в составе полимер-модифицированных электродов. Установление корреляции между различными свойствами подобных полимеров и определение инструментов управления их функциональностью относятся к приоритетным задачам современного материаловедения, решение которых позволяет создавать материалы нового поколения с комплексом заранее заданных характеристик. Выявление основных закономерностей состав-структура-свойство в отношении функционального материала должно также учитывать его взаимодействия с другими компонентами электрохимической системы конечного устройства (электродом-подложкой, фоновой солью, электролитным растворителем).

Редокс-активные полимерные формы комплексов переходных металлов с лигандами саленового типа предложены для использования в гибридных суперконденсаторах, литий-ионных конденсаторах, литий-ионных аккумуляторах, литий-воздушных батареях, электрохимических транзисторах [1,2]. Эти полимерные материалы представляют собой иммобилизованные на токопроводящих подложках проводящие трехмерные матрицы, в которых цепочечные фрагменты с ковалентными связями углерод-углерод образуют различные надмолекулярные структуры. Ранее была установлена существенная зависимость параметров электродных процессов с участием рассматриваемых полимеров от молекулярного состава металлокомплексов и природы электролита [1,2].

Целью данной работы является исследование влияния взаимодействий между металл-саленовыми полимерами и электролитным растворителем на функциональные характеристики материалов на примере полимерных комплексов никеля(II) с лигандами ряда Saltmen (2,3-диметил-N,N'-бис(салицилиден)бутан-2,3-диамин).

Для решения этой задачи полимерные металлокомплексы были синтезированы в виде модифицирующих электродных слоев методом окислительной электрохимической полимеризации и исследованы методами *in situ* измерения проводимости на гребенчатых микроэлектродах, кварцевой микрогравиметрии и УФ-видимой спектроскопии в процессе электрохимического легирования (*p*-допирования) в растворах электролитов, содержащих растворители с различными донорными свойствами, полярностью и вязкостью. Обнаружена зависимость параметров электронного и ионного транспорта в полимерах от физико-химических характеристик растворителя электролитной системы, что указывает на необходимость учета специфических и неспецифических взаимодействий в системе «полимер – растворитель» при направленном синтезе функциональных полимерных материалов на основе металл-саленовых комплексов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-73-01261)

1. Freire C. et al. Metallo(salen) complexes as versatile building blocks for the fabrication of molecular materials and devices with tuned properties // *Coord. Chem. Rev.* 2019. V. 394. P. 104–134.
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.

Полимерные композиционные материалы на основе фотополимерной смолы и малослойного графена***С.И. Титова^{1,2}, А.А. Возняковский²***

E-mail: sofia.titova@internet.ru

¹*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*²*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

DIGITAL LIGHT PROCESSING (DLP) – метод 3D-печати, основанный на отверждении фотополимерной смолы под воздействием света, позволяет получать изделия с крайне высокой детализацией по сравнению с другими методиками печати. Однако изделия из фотополимерных смол характеризуется низкими значениями прочностных и теплофизических характеристик, что ограничивает их применение.

Целью данной работы является изучение влияния модифицирующих добавок малослойного графена (МГ), полученного в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), на прочностные и теплофизические характеристики изделий, изготовленных DLP методом 3D-печати. В качестве наполнителя использовали МГ, полученный в условиях СВС из крахмала и окислителя нитрата аммония в соотношении 1:1 [1]. Важным преимуществом МГ, синтезированного в условиях СВС, является отсутствие дефектов Стоуна-Уэйлса, практически неизбежных при синтезе другими методами, поэтому использование этого наполнителя позволяет значительно улучшать комплекс прочностных и теплофизических свойств композитов [2]. Модифицирование фотополимерной смолы (ФС) марки Anycubic проводили путем последовательного добавления равномерных порций МГ в чистую ФС, нагретую до 50 °С, при постоянном перемешивании верхнеприводной мешалки (500 об/мин). Концентрация добавок составляла от 0,25 до 4 масс. %, что соответствовало от 0,475 до 7,6 об. %. Полученную суспензию выдерживали в ультразвуковом поле (22 кГц) в течение 1 ч при температуре 50 °С до получения стабильной суспензии, после чего модифицированную ФС охлаждали, помещали в DLP-принтер Anycubic Photon S (Китай) и изготавливали образцы необходимых размеров для дальнейших измерений. Параметры 3D-печати были следующими: длина волны отверждения 405 нм, толщина слоя засветки 50 мкм, время засветки 6 с. Полученные образцы подвергали постобработке с оптимальными условиями ее проведения: сначала проводилась УФ-обработка в течение 1 ч, затем термический отжиг в течение 1 ч при температуре 70 °С. Твердость по Бринеллю осуществляли на твердомере Метротест ИТБ-3000-АМ (РФ), прочность на изгиб на гидравлическом прессе ПМ-МГ4 (РФ), теплопроводность по методу лазерной вспышки при 25 °С на установке DFX-200 (USA). Все измерения проводили по ГОСТ.

В результате модифицирования фотополимерной смолы малослойным графеном и создания полимерных композитов DLP методом удалось повысить твердость и прочность на изгиб в 2 раза, теплопроводность в 6 раз при концентрации МГ 2 масс. %. При дальнейшем увеличении концентрации МГ до 4 масс. % происходит ухудшение прочностных и теплофизических характеристик. Частицы МГ, синтезированные в условиях СВС процесса, показали себя как эффективные наполнители, способные значительно повысить комплекс прочностных и теплофизических свойств полимерных композиционных изделий, изготовленных DLP методом 3D-печати.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ №20-53-04026

1. Voznyakovskii A., Vozniakovskii A., Kidalov S. New Way of Synthesis of Few-Layer Grapheme Nanosheets by the Self Propagating High-Temperature Synthesis Method from Biopolymers // *Nanomaterials*. 2022. V. 12. No 4. ID 657.
2. Voznyakovskii A., Neverovskaya A., Vozniakovskii A., Kidalov S. A Quantitative Chemical Method for Determining the Surface Concentration of Stone–Wales Defects for 1D and 2D Carbon Nanomaterials // *Nanomaterials*. 2022. V. 12. No 5. ID 883.

Полупроводниковые материалы для создания перспективной компонентной базы и развития отечественной микроэлектроники: перовскиты

О.В.Вольяс^{1,2}

E-mail: o.volpyas@rtc.ru

¹ ГНЦ РФ Центральный научно-исследовательский институт робототехники и технической кибернетики, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова, Санкт-Петербург, Россия

В современной микроэлектронике невозможно обойтись без использования новых типов материалов. Научным сообществом активно изучаются перовскитные соединения, их структура, электрофизические и магнитные свойства.

Перовскиты представляют собой материалы, обладающие кристаллической структурой, описать которую можно, используя следующую формулу: ABX_3 , где А – катион большого размера (положительно заряженный ион), В – катион с размером меньше, чем А, Х – анион (отрицательно заряженный ион). Кристаллическая структура перовскита может быть кубической, орторомбической, тетрагональной. Перовскиты могут выстраиваться в различных плоскостях, включая 2D-, 1D- и 0D-структуры [1, 2]. Перовскиты встречаются в природе, в нижнем слое мантии Земли. Кроме того, некоторые перовскитные соединения можно синтезировать.

Предметом исследования у перовскитных материалов является чувствительность их свойств к изменению процентного соотношения компонентов. Так, при изменении соотношения компонентов в составе перовскита появляется возможность управлять шириной запрещенной зоны и чувствительностью к различным диапазонам светового излучения. Именно эта особенность является преимуществом перовскитных соединений и делает их востребованными при производстве солнечных батарей.

Перовскиты показывают отличную стойкость к дефектам структуры, а детекторы на их основе обладают повышенной износостойкостью. В связи с этим на основе перовскитных соединений производят детекторы альфа- и бета-частиц, гамма-, рентгеновского и нейтронного излучений [5].

Таким образом, использование перовскитных материалов актуально при изготовлении солнечных батарей с высоким коэффициентом полезного действия, при создании светодиодов и рабочих сред лазеров, других приборов оптической электроники и микроэлектроники. Гибридные перовскитные соединения востребованы при производстве детекторов всех видов излучений в составе измерительной аппаратуры.

Результаты получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России FNRG-2023-0001 1022113000016-5-2.5.1 № 075-03-2023-193/2 «Исследование влияния нейтронного излучения на свойства полупроводниковых материалов»

1. Урусов, В.С. Теоретическая кристаллохимия / В.С. Урусов. – Москва : МГУ, 1987. – С. 275.
2. Moure C. Recent advances in perovskites: Processing and properties / C. Moure, O. Peña // Progress in Solid State Chemistry. – 2015. – V. 43, № 4. – P. 123-148.
3. Assirey E. Perovskite synthesis, properties and their related biochemical and industrial application // Saudi Pharmaceutical Journal. – 2019. – Т. 27, № 6. – С. 817-829.
4. Березин А. Горизонт перовскитных событий // N+1: электронный журнал. – URL: <https://nplus1.ru/material/2020/04/17/perovskite-solar-cells-future>. – Дата публикации: 17.04.2020.
5. Andričević P. Hybrid halide perovskite neutron detectors / P. Andričević, G. Náfrádi, M. Kollár [et al.] // Scientific Reports : электронный журнал. – URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-021-955863>. – Дата публикации: 30.08.2021

Исследование влияния режимов предварительной наплавки и термообработки на свойства сварных соединений из сталей марок 10X9МФБ и 10X2М

Т.А. Жужгина¹, В.С. Скутин¹

E-mail: Zhuzhgina@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Проведение данной работы обусловлено необходимостью выполнения для оборудования АЭУ сварных соединений из стали мартенситного класса марки 10X9МФБ со сталью перлитного класса марки 10X2М. Основной проблемой сварки этих сталей является разница в температурах послесварочных отпусков. В соответствии с требованиями НП-104-18 температура обязательного послесварочного отпуска сварных соединений из стали марки 10X9МФБ составляет (760 ± 10) °С, тогда как для стали марки 10X2М всего (710 ± 20) °С [1].

С учетом изложенного рассматривается технология сварки стали марок 10X9МФБ и 10X2М с выполнением предварительной наплавки на кромки деталей из стали марки 10X9МФБ и ее влияние на свойства сварного соединения. В ходе проведения экспериментальных работ была выполнена серия наплавленных проб ручным дуговым способом сварки покрытыми электродами, где значение силы сварочного тока составляло 90, 110 и 130 А.

Анализ твердости в зоне термического влияния наплавки, выполненных при пониженной величине силы сварочного тока (90 А) и при повышенной силе сварочного тока (110 А) показал, что уменьшение тепловложения в металл ЗТВ не привело к значимому снижению твердости в околошовном участке [2]. Следовательно, уменьшение силы сварочного тока в исследованных пределах не оказало существенного влияния на процессы закалки в ЗТВ исследованной стали.

При проведении серии послесварочных термообработок темплетов из стали 10X9МФБ с предварительной наплавкой, где температура отпуска варьировалась от 720 °С до 770 °С, установлено, что снижение твердости в околошовной зоне мартенситной стали происходит уже при температуре отпуска 720 °С. Дальнейшее повышение температуры послесварочного отпуска если и приводит к снижению твердости, то незначительному. Особенно это касается зоны термического влияния стали 10X9МФБ.

При исследовании химического состава металла наплавленных темплетов, подвергнутых послесварочному отпуску при температуре в 760 °С, было выделено несколько зон с целью изучения влияния перемешивания металла предварительной наплавки с основным металлом стали марки 10X9МФБ на содержание основных химических элементов.

При изучении изменения содержания хрома в зависимости от используемой технологии выполнения предварительной наплавки, выяснилось, что при значении силы сварочного тока 110 А обеспечивается наиболее равномерное перемешивание металла наплавки с основным металлом стали марки 10X9МФБ. Это позволяет произвести рациональный и обоснованный выбор сварочного режима предварительной наплавки на сталь 10X9МФБ.

1. НП-104-18. Сварка и наплавка оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок. Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору. – Москва. – 2019. – 248 с. – URL: <https://docs.secnrs.ru/documents/nps/НП-104-18/НП-104-18.pdf>
2. ГОСТ 2999-75. Металлы и сплавы. Метод измерения твердости по Виккерсу. Государственный стандарт союза ССР. – Москва. – 1976. – 31 с. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200004651>

Исследование путей создания детектора из особо чистого германия для полупроводникового спектрометра

М.В. Ремизов¹, П.В. Семенихин², О.В. Вольня³, Ю.Ю. Буньков³

E-mail: m.reizov97@gmail.com

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

²*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*

³*Федеральное государственное автономное научное учреждение Центральный научно-исследовательский институт робототехники и технической кибернетики, Санкт-Петербург, Россия*

Классические спектрометры представляют собой сборку из сцинтиллятора, представляющего собой кристалл, например, NaI, и фотоэлектронного умножителя. Гамма-квант попадает на кристалл, вызывая вспышку света, которая улавливается фотоэлектронным умножителем, вызывая электронный каскад, который дальше обрабатывается электроникой. В случае полупроводникового спектрометра необходимый сигнал получают за счет внутреннего фотоэффекта, вызываемого прохождением, гамма-кванта через детектор, который представляет собой рpn-диод. Полупроводниковые гамма-спектрометры, несмотря на более низкую эффективность регистрации гамма-излучения (при рассмотрении равного по объему сцинтилляционного детектора), на порядок превосходят сцинтилляционные аналоги по энергетическому разрешению, что позволяет использовать их в большем количестве задач, в частности проводить измерения делящихся материалов и продуктов их распада на нейтронном фоне

Долгое время не могли достигнуть необходимой степени очистки от примесей германиевого слитка, поэтому было необходимо легировать кристалл литием [1]. Это приводило к необходимости постоянно поддерживать криогенную температуру вокруг детектора, чтобы не допустить диффузии лития вглубь кристалла. Однако в конце прошлого века появилась технологическая возможность изготавливать монокристаллы германия необходимой степени очистки, тем самым сделав их устойчивыми для хранения при нормальной температуре [2].

Был получен слиток особо чистого германия отечественного производства, произведена механическая обработка, необходимая для изготовления рpn-диодов коаксиального и планарного типов. Также были испробован способ легирования кристалла с помощью термической диффузии и напыления контактов, после чего на получившийся рpn-диод поместили в сосуд с жидким азотом, подавали высокое напряжение, подносили источник ¹³⁷Cs и, с помощью осциллографа, отслеживали изменение сигнала. В дальнейшем планируется сборка прототипа полупроводникового спектрометра.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России FNRG-2023-0001 1022113000016-5-2.5.1 № 075-03-2023-193/2

1. P.H. Stelson, J.K. Dickens, S. Raman, and R.C. Trammell, "Deterioration of Large Ge(Li) Diodes Caused by Fast Neutrons," Nuclear Instruments and Methods 98, 481 (1972).
2. W. L. Hansen & E.E. Haller, High-Purity Germanium Crystal Growing. MRS Online Proceedings Library volume 16, pages 1–16 (1982).

Радиолиз и фотолиз фолиевой кислоты в составе конъюгата с фуллереном C₆₀ и поливинилпирролидоном***Д.В. Байков¹, Д.В. Звягина¹, А.А. Борисенкова^{1,2}***

E-mail: baykovdm42@gmail.com

¹*Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург*²*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина*

Поглощение фолиевой кислоты (ФК) клетками опосредовано фолатными рецепторами, количество которых повышено на поверхности некоторых типов раковых клеток. Эта особенность традиционно используется для создания систем селективной доставки лекарств [1], в том числе, радиоизотопов. Одним из перспективных носителей радиоизотопа является фуллерен, молекула которого может заключать в себе радиоактивный атом, который будет ограничен от нежелательного взаимодействия со средой организма. В качестве связующего компонента целесообразно использовать биосовместимый полимер, например, поливинилпирролидон (ПВП), содержащий гидрофобную углеродную цепь, необходимую для стабилизации частиц фуллерена и ФК в растворе, и гидрофильный пирролидоновый фрагмент, способствующий приданию растворимости в воде компонентам конъюгата.

Известно, что ФК разлагается под воздействием УФ- и ионизирующего излучения [2], поэтому целью нашей работы была оценка поведения ФК в составе конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ и целесообразности ее применения в качестве нацеливающего лиганда для препарата, содержащего радиоактивный изотоп.

Конъюгат ФК-ПВП-C₆₀ синтезировали путем перемешивания при температуре 80 °С растворов фуллерена C₆₀ в N,N-диметилформамиде (ДМФА) и предварительно подготовленного конъюгата ПВП K25 и ФК, полученного также при перемешивании компонентов в ДМФА. Структуру и состав ФК-ПВП-C₆₀ устанавливали с помощью элементного анализа, ИК-, УФ-спектроскопии, флуоресцентного и термического анализа. Водные растворы конъюгата ФК-ПВП-C₆₀ в диапазоне концентраций 0.1-25 мг/мл облучали электронами с энергией 5 МэВ дозой 25 кГр и УФ-лампой коротковолнового спектра (180-275 нм) в течение 180 минут.

По данным элементного анализа синтезированный конъюгат с растворимостью в воде ~ 50 мг/мл содержал 8,9 % ФК и 2,8 % C₆₀. Макромолекулярная цепь ПВП в конъюгате в среднем содержала 1 молекулу C₆₀ и 7 молекул ФК. Конъюгат, вероятнее всего, представлял собой смесь макромолекул нативного ПВП и конъюгата ФК-ПВП-C₆₀, при этом ФК связывалась с ПВП не ковалентно. Установлено, что деградация ФК в составе конъюгата при воздействии УФ- и электронного облучения носит дозозависимый характер, и наиболее чувствительной к воздействию облучения является связь между такими составляющими ФК как птерин и Р-аминобензолат.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 23-73-01085

1. Gruzdev D. A. et al. Carborane-Containing Folic Acid bis-Amides: Synthesis and In Vitro Evaluation of Novel Promising Agents for Boron Delivery to Tumour Cells //International Journal of Molecular Sciences. – 2022. – Т. 23. – №. 22. – С. 13726.
2. Tsyupka D. V. et al. High-fluorescent product of folic acid photodegradation: Optical properties and cell effect //Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. – 2021. – Т. 407. – С. 113045.

Изучение влияния химического состава отливок на их прочностные свойства методом корреляционного анализа

С.А. Беляев¹, Т.А. Екимова¹

E-mail: belyaev.trener@mail.ru

¹Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Изучение влияния химического состава отливок на их прочностные свойства является актуальной задачей для литейных предприятий, поскольку рассчитанные коэффициенты корреляции, показывающие влияние определенного химического элемента на определенное механическое свойство, ложатся в основу предсказательных моделей, позволяющих определить вероятность появления брака в отливке еще до ее изготовления [1].

Целью данной работы является проведение разведочного анализа данных для определения явных и неявных зависимостей и расчет корреляционных коэффициентов между химическим составом отливок и их механическими свойствами. Был проведен анализ данных о химическом составе и механических свойствах отливок из чугунов марки ВЧ 50.

Отбраковка изделий на литейных предприятиях производится по наиболее важным механическим свойствам: твердость, условный предел текучести, временное сопротивление при растяжении, относительное удлинение после разрыва [2]. В случае если отливка имеет небольшое отклонение от химического состава, регламентированного ГОСТом, но при этом ее механические свойства соответствуют требованиям, то такая отливка не считается бракованной. Для оценки степени влияния химического состава на механические свойства были построены графики зависимости «химический элемент - механическое свойство» для всех величин, а также диаграммы размаха. Показано, что разброс данных слишком велик и нет явных зависимостей между химическим составом и механическими свойствами.

На следующем этапе разведочного анализа данных была проведена оценка того, подчиняется ли распределение каждого из параметров нормальному закону. Оценка проводилась графическим методом определения соответствия значений выборки нормальному распределению. Этот этап очень важен, так как от его результатов будет зависеть выбор способа расчета коэффициента корреляции. Показано, что ни один из анализируемых параметров не подчиняется нормальному распределению. Это означает, что использовать для анализа корреляций между анализируемыми параметрами коэффициент корреляции Пирсона, который обычно применяется в корреляционном анализе, нельзя. В данном случае нужно использовать критерий Спирмена.

По результатам непараметрического корреляционного анализа были установлены следующие общие зависимости: содержание углерода не влияет на относительное удлинение при разрыве и условный предел текучести; содержание марганца не влияет на условный предел текучести; содержание меди не влияет на относительное удлинение при разрыве. Влияние остальных элементов на механические свойства является статистически значимыми. В дальнейшем полученные в результате работы данные были использованы для построения предсказательных моделей для соотношения «химический состав- механическое свойство» методами нечеткой логики.

Исследование, описанные в данной работе, были проведены в рамках реализации Программы поддержки НИОКР студентов, аспирантов и лиц, имеющих ученую степень, финансируемой Правительством Республики Карелия

1. Дьяконов Н. А. Логунова О. С. Системы управления технологическим процессом на основе предиктивной аналитики: проектирование // Электротехнические системы и комплексы. 2021. № 1 (50). С. 58–64.
2. ГОСТ 7293-85 Чугун с шаровидным графитом для отливок. Марки. — М.: ИПК Издательство стандартов, 2004 год.

Спектральные свойства β -кетоиминатов дифторида бора в полимерной матрице***Р.Е. Бодык¹, А.А. Хребтов^{1,2}, Г.О. Третьякова^{1,2}***

E-mail: bodyk.re@dvfu.ru

¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия²Институт химии Дальневосточного отделения Российской академии наук, Владивосток, Россия

Исследование люминесцентных полимерных материалов не теряет своей актуальности по сей день. На основе данных материалов разрабатываются светоизлучающие диоды, фотоэлектрические элементы, транзисторы [1-3]. Также их применяют при создании люминесцентных сенсоров, для целей биомедицинской визуализации и в smart-материалах. В качестве красителя в полимерных люминесцентных композициях (ПЛК) применяют различные органические люминофоры, например, β -дикетонаты дифторида бора [4]. β -Кетоиминаты дифторида бора, структурные и электронные азотсодержащие аналоги данных веществ, также могут быть использованы для изготовления полимерных люминесцентных композиций, однако их свойства изучены менее комплексно.

Целью данной работы является изучение влияния концентрации β -кетоиминатов дифторида бора на спектральные свойства ПЛК на основе поликарбоната (ПК).

Пленочные образцы ПЛК получали методом полива из раствора полимера с люминофором на очищенную полипропиленовую подложку с последующим высушиванием пленок в вытяжном шкафу в течение 24 часов при комнатной температуре. Для приготовления раствора использовали 0,25 г ПК, растворенного в 5 мл 1,2-дихлорэтана. В качестве люминофоров выступали β -кетоиминаты дифторида бора с водородным (1) и метильным (2) заместителями в хелатном цикле у атома азота. Для двух групп образцов содержание люминофора в композициях составило 0,05 и 0,5 % от массы ПК. Были зарегистрированы стационарные спектры возбуждения люминесценции и люминесценции с помощью спектрофлуориметра Shimadzu RF5301.

Исследование спектральных свойств ПЛК показало, что в целом для красителей группы 1 и 2 максимумы спектров возбуждения люминесценции батохромно смещаются при увеличении концентрации, что может свидетельствовать об агрегации красителя [5]. Однако при этом спектры люминесценции образцов практически не изменяются. Стерические затруднения, вызванные заместителями у атома азота в хелатном цикле, а также неплоская геометрия хелатного цикла препятствуют формированию надмолекулярных структур β -кетоиминатов дифторида бора, в результате чего данные соединения даже в кристаллическом состоянии проявляют мономерную люминесценцию [6]. Таким образом, красители группы 1 и 2 в полимерной матрице даже при высокой концентрации демонстрируют преимущественно мономерную люминесценцию, в отличие от кислородных аналогов (β -дикетонатов дифторида бора).

1. Mitschke U., Bäuerle P. The electroluminescence of organic materials // J. Mater. Chem. 2000. Vol. 10. P. 1471-1507.
2. Brabec C. J., Sariciftci N. S., Hummelen J. C. Plastic Solar Cells. Advanced Functional Materials // Adv. Funct. Mater. 2001. Vol. 11. No. 11. P. 15-26.
3. Stutzmann N. et al. 3. Self-Aligned, Vertical-Channel, Polymer Field-Effect Transistors // Science. 2003. Vol. 299. P. 1881-1884.
4. Zhuang M., Joshi S., Sun H., Batabyal T. et al. Difluoroboron β -diketonate polylactic acid oxygen nanosensors for intracellular neuronal imaging // Scientific Reports. 2021. Vol. 11. No 1076.
5. Fedorenko E. V., Khrebtov A. A., Mirochnik A. G. et al. Polymer films doped with dimethylaminostyryl β -diketonates of boron difluoride: Spectral properties and influence of the polymer matrix // Journal of Luminescence. 2021. Vol. 235. Art. 118-043.
6. Fedorenko E. V., Mirochnik A. G., Beloliptsev A. Y. et al. Design, Synthesis, and Crystallization-Induced Emission of Boron Difluorides β -Ketoiminates // ChemPlusChem. – 2018. – Vol. 2017. – P. 5191-5196.

Анализ методов реконструкции первичного аустенитного зерна в сталях бейнитно-мартенситного класса в пакете MTEX Matlab

О.Д. Боровская², Э.А. Ушанова^{1,2}, С.Н. Петров^{1,2}

E-mail: npk3@crism.ru

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

² НИЦ "Курчатовский институт" - ЦНИИ конструкционных материалов "Прометей" им. И.В. Горынина, Санкт-Петербург, Россия

Стали бейнитно-мартенситного класса в настоящее время широко применяются для изготовления ответственных конструкций и деталей. В связи с этим, актуальным является исследование и расширение методов анализа структуры и свойств подобных сталей.

Метод дифракции обратнорассеянных электронов (EBSD, Electron backscatter diffraction) позволяет производить анализ большого спектра характеристик – ориентации отдельных зерен, текстуры, распределения фаз и расположения границ зерен. В настоящей работе на основе EBSD данных с помощью пакета MTEX Matlab выполнена реконструкция границ первичных аустенитных зерен (ПАЗ) в сталях 09ХН4МДФ и 09ХН2МД с помощью двух методов обработки данных.

Первый метод выявления границ ПАЗ основан на том, что границы, имеющие углы разориентировки вне интервала от 20° до 50°, образуются из одного ПАЗ [1]. Второй метод реализован в пакете MTEX Matlab с помощью функции parentGrainReconstructor, позволяющей восстанавливать ПАЗ в мартенсите. Оба метода основаны на кристаллогеометрических соотношениях при γ - α превращении [2].

Оба метода реконструкции ПАЗ в пакете MTEX позволяют выявить значительную долю границ в стали мартенситного класса 09ХН4МДФ. В стали мартенситно-бейнитного класса 09ХН2МД восстановлена меньшая часть границ, так как превращение протекает по смешанному механизму, и восстановление на основании кристаллографических соотношений затруднено.

При исследовании стали мартенситно-бейнитного класса 09ХН2МД было дополнительно проведено сравнение полученных границ ПАЗ с границами, выявленными с помощью метода вакуумного травления. Построенные с помощью MTEX границы, не совпали с результатами травления, что свидетельствует о слабом наследовании структуры в данной стали.

Применение обоих методов реконструкции ПАЗ в пакете MTEX Matlab позволяет произвести оценку среднего размера зерна с помощью программы ThixometPro и шкал оценки из ГОСТ5639-82. «Стали и сплавы. Методы выявления и определения величины зерна». Оба метода выявления ПАЗ показали сходную оценку размера зерна, в соответствии с которой обе стали относятся к мелкозернистым.

1. Петров С.Н., Пташник А.В. Экспресс-метод определения границ бывшего аустенитного зерна в сталях бейнитно-мартенситного класса по локальным ориентировкам превращенной структуры// Металловедение и термическая обработка металлов. - 2019 г. – 5 – С. 15-21.
2. Теория термической обработки металлов. Учебник. Изд.3-е, испр. и доп. Новиков И.И. М., «Металлургия», 1978, 392 стр.

Экспериментальные исследования стойкости к межкристаллитной и питтинговой коррозии нержавеющей стали, полученных аддитивными методами

Д.Н. Чайникова¹, О.Н. Парменова¹

Email: npk3@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время в атомной энергетике наблюдается тенденция к активному применению аддитивных технологий для изготовления деталей и конструкций из порошков нержавеющей стали [1-4]. При этом, для данных материалов сохраняются высокие требования по обеспечению стойкости к межкристаллитной (МКК) и питтинговой (ПК) коррозии. В связи с этим целью данного исследования являлось выявление «узких» мест, характерных для испытаний на стойкость к МКК и ПК образцов нержавеющей стали, полученных при селективном лазерном сплавлении (СЛС).

Объектами исследования служили стали марок 08X18H10T, 03X17H13M2T и 04X20H6Г11M2АФБ. Коррозионные испытания выполняли стандартными методами по ГОСТ 6032 (МКК), ГОСТ 9.912 (ПК, электрохимический метод – снятие поляризационных кривых) и ASTM G48 (ПК, химический метод – по потере массы при выдержке в растворе хлорного железа).

По результатам экспериментов установлено, что определение склонности к МКК необходимо проводить на основании металлографических исследований, т.к. дефектность (наличие «корочки») на поверхности образцов может проявляться в виде трещин на изогнутой части, вводя в заблуждение в части интерпретации результатов испытаний. В то же время, исследования микроструктуры однозначно выявляет трещины и сенсибилизацию сталей.

Рекомендовано изготовление изделий из нержавеющей стали, синтезированных методом СЛС, производить из порошков с более низким содержанием углерода, чем у традиционных аналогов. Для устранения склонности к МКК и ПК материалов, полученных при СЛС, применять более высокотемпературную термообработку, обеспечивающую полное растворение карбонитридов хрома.

Показано, что сопротивляемость ПК синтезированных при СЛС материалов определяется в первую очередь особенностями строения металла (наличием плотного слоя двукратно переплавленного металла на поверхности образцов, сферических частиц, не проплавленного металла, брызг и пор).

1. К.О. Базалева, Е.В. Цветкова, Э.В. Балакирев, Е.В. Базалеев, А.В. Казаков Механическое и электрохимическое поведение аустенитного сплава, синтезированного методом селективного лазерного плавления / *Материаловедение*, 2019, №3, С. 24-29.
2. В.И. Зельдович, И.В. Хомская, Н.Ю. Фролова, А.Э. Хейфец, Д.Н. Абдуллина, Е.А. Петухов, Е.Б. Смирнов, Е.В. Шорохов, А.И. Клёнов, А.А. Пильщиков Структура и механические свойства аустенитной нержавеющей стали, полученной методом селективного лазерного плавления / *Физика металлов и материаловедение*, 2021, Т. 122, №5, С. 527-534.
3. Д.П. Елисеев, К.С. Малашенков Оценка качества и механических свойств образцов аустенитной стали, полученных с использованием аддитивной технологии / *Металлы*, 2020, №6, С. 77-83.
4. А.А. Popovich, V.Sh. Sufiiarov, E.V. Borisov, I.A. Polosov, D.V. Masaylo, A.V. Grigoriev Anisotropy of mechanical properties of products manufactured using selective laser melting of powdered materials *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya*, 2016, №3, С. 4-11.

Исследование масштабного эффекта при испытаниях на статическую трещиностойкость с использованием численного моделирования и локальных критериев разрушения

Р.О. Черчиев¹, А.А. Лаврентьев¹, Д.Р. Бараков¹

E-mail: Cherchiev@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

При разработке и производстве конструкций ответственного значения, эксплуатируемых при высоких нагрузках и низких температурах, особое внимание уделяется трещиностойкости материала. За статическую трещиностойкость отвечают критическое значение коэффициента интенсивности напряжений (K_{IC}) и J-интеграла. Эти параметры определяются при испытаниях образцов натурной толщины, что увеличивает трудоёмкость изготовления образцов и проведение испытаний при переходе к металлу больших толщин. Избежать таких затрат можно, анализируя результаты менее трудоемких видов испытаний и исследований. В работах [1,2] показано, что на базе данных о микроструктурном состоянии материала и результатов испытаний на статическое растяжение маломасштабных образцов с концентратором можно оценить уровень статической трещиностойкости материала, применяя соответствующий локальный критерий разрушения. Но для обеспечения большей точности также необходимо учитывать масштабный эффект, который приводит к разнице в параметрах статической трещиностойкости при испытаниях образцов разной толщины.

Целью настоящей работы является анализ связи особенностей напряженно-деформированного состояния (НДС) образцов разного размера с проявлением масштабного эффекта при их испытании на трещиностойкость.

В рамках работы получены результаты моделирования в ANSYS Mechanical APDL трехточечного изгиба образцов типа SENB с краевой трещиной, выполнен анализ их НДС. Моделировались испытания образцов двух разных толщин, для которых получены реальные значения параметров трещиностойкости по результатам механических испытаний. Испытанные образцы изготовлены из высокопрочной стали 10ХН4МДФ.

Полученные результаты могут быть использованы при дальнейшем развитии подхода к прогнозированию статической трещиностойкости.

1. Ильин А.В., Лаврентьев А.А., Мизецкий А.В. О формулировке локального критерия хрупкого разрушения для прогнозирования трещиностойкости высокопрочной стали. ISSN 1994-6716 Вопросы материаловедения, 2020, №3 (103), с.114-134.
2. Ильин А.В., Лаврентьев А.А., Мотовилина Г.Д., Забавичева Е.В., Петров С.Н. О корреляции статической трещиностойкости высокопрочной среднелегированной стали с параметрами структурного состояния и стандартными механическими свойствами. ISSN 1994-6716 Вопросы материаловедения 2023, №1 (113), с.103-123.

Технологические способы повышения прочности хромникельмолибденовой стали

Е.В. Другачук¹, М.В. Голубева¹, О.В. Сыч¹, С.В. Коротовская¹

E-mail: npk3@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время в судостроении широко используется высокопрочная судостроительная хладостойкая сталь с гарантированным пределом текучести 590 МПа хромникельмолибденовой композиции легирования, изготавливаемая по технологии закалки с отпуском. Длительное время в высокопрочных хладостойких сталях повышение прочности достигалось за счет увеличения легирования дорогостоящими элементами, в первую очередь никелем и хромом, что в современных экономических условиях нецелесообразно. При этом изменение механических свойств от введения легирующих элементов можно компенсировать путем использования специальных режимов термомеханической и термической обработки [1-4].

Проведенные исследования указали на технологические возможности повышения прочностных характеристик стали без изменения уровня легирования за счет управления температурно-деформационной схемой прокатки и режимами термической обработки.

В связи с этим целью работы являлось исследование взаимосвязи структуры и свойств со схемой деформации, температурой закалки и высокого отпуска.

Для определения технологических параметров, обеспечивающих формирование дисперсной бейнитно-мартенситной структуры выполнено моделирование процесса горячей прокатки с последующим термоулучшением на пластометре «Gleeble 3800». Установлено, что за счет варьирования схемы деформации по проходам при прокатке и температуры закалки можно количественно управлять морфологией, дисперсностью и соотношением структурных составляющих (реечного мартенсита, реечного и гранулярного бейнита) исследованной стали.

Установлено, что для образцов после горячей пластической деформации с возрастающей схемой обжатий по проходам и закалки от температуры 950 °С изменение температуры отпуска от 610 до 690 °С позволяет варьировать прочностные характеристики в широких пределах (средних значений предела текучести – 775...590 МПа) при сохранении вязко-пластических свойств на высоком уровне (значений относительного удлинения - не менее 18 % и работы удара при температурах испытаний минус 40 и минус 60 °С - не менее 230 Дж).

Повышение прочности с сохранением достигнутого уровня хладостойкости позволит создать не имеющий аналогов на мировом рынке материал для конструкций, используемых для эксплуатации в условиях Крайнего Севера.

1. Рыбин В. В., Малышевский В. А., Хлусова Е. И. Высокопрочные свариваемые улучшаемые стали. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2016. – 212 с.
2. Ковальчук М. В., Орыщенко А. С., Малышевский В. А., Петров С. Н., Шумилов Е. А. К вопросу об унификации химического состава высокопрочных сталей для судостроения // Вопросы материаловедения. – 2018. – № 1(93). – С. 7–14.
3. Голосиенко С. А., Мотовилина Г. Д., Хлусова Е. И. Влияние структуры, сформированной при закалке, на свойства высокопрочной хладостойкой стали после отпуска // Вопросы материаловедения. – 2008. – № 1(53). – С. 32–44.
4. Изменение структуры высокопрочной экономнолегированной стали марки 09ХГН2МД при отпуске / М. В. Голубева, О. В. Сыч, Е. И. Хлусова и др. // Вопросы материаловедения. – 2018. – № 1(93). – С. 15–26.

Сравнение механических свойств и микроструктуры компактированных изделий, полученных из титановых порошков различных фракционных составов

С.Д. Другачук¹, Ю.Ю. Малинкина¹, к.т.н., И.М. Хачатурян¹

Email: drugachuksd@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Для изделий морской техники 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. Также применение микрогранул в порошковой металлургии обеспечивает равномерную мелкозернистую структуру и минимальную дисперсию механических свойств крупногабаритных деталей, следовательно, данная технология перспективна для получения ответственных деталей морской техники [1-3].

Целью настоящей работы являлось исследование механических свойств и микроструктуры компактированных изделий из титановых порошков псевдо- β сплава различных фракционных составов (менее 50, 50-100, 100-150 и 50-140 мкм), полученных методом ГИП, а также оценка возможности использования плотности упаковки порошковой смеси в качестве критерия подбора гранулометрического состава для технологии горячего изостатического прессования.

В работе проведены исследования гранулометрического состава титановых порошков, применён расчёт пространственной упаковки частиц, в рамках модели твердых сфер для различных фракционных составов, на основе полученных выражений получена теоретическая плотность упаковки порошков различных фракционных составов и оценена перспектива использования данной модели для изготовления изделий технологией горячего изостатического прессования. Исследования механических свойств и микроструктуры проводились на образцах, полученных по режиму температура 730°C, давление 140 МПа, выдержка 6 часов.

По результатам исследования можно сделать вывод о том, что для данного режима газостатирования удовлетворительный уровень механических свойств и однородность структуры достигается на фракционном составе менее 50, 50-100 и 50-140 мкм.

1. 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.
2. Kansai A.R., Torquato S., Stillinger F.H. Computer generation of dense polydisperse sphere packings / A.R. Kansai, S. Torquato, F.H. Stillinger // J. Chem. Phys. .V. 117. 2002. P. 8212.
3. И.Р. Козлова, Е.В. Чудаков, Н.В. Третьякова, Ю.М. Маркова, Е.А. Васильева Влияние термической обработки на формирование структуры и уровень механических свойств высоколегированного титанового сплава // Вопросы материаловедения, 2019, №4 (100), с.28-39.

Антифрикционный углепластик на основе модифицированной терморезактивной матрицы

Д.Д. Дворянцев, И.В. Лишевич, А.С. Саргсян, А.С. Савелов, Е.А. Шарко

E-mail: nprk11@crism.ru

Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Эксплуатируемые в настоящее время подшипники скольжения из углепластика УГЭТ на основе углеродной ткани и эпоксидной матрицы ЭТ-2 из-за малой величины предельной деформации и высокого модуля упругости недостаточно деформируются в случае расцентровки и перекоса вала контртела, что приводит к уменьшению эффективной площади трения и значительному увеличению удельной нагрузки, что, в свою очередь, ведет к повышенному износу подшипника [1,2].

Целью работы является повышение пластичности антифрикционного углепластика путем замены матрицы ЭТ-2 на модифицированную. Рассмотрены композиции на основе хлорсодержащей эпоксидной смолы, пластификаторов, низкомолекулярного аминного отвердителя с ускорителем (экспериментальные связующие ЭТ-4, ЭТ-5, ЭТ-6). Обоснована роль пластификатора и его влияние на свойства композиционного материала [3].

Проведены физико-механические испытания по определению предела прочности при сжатии, изгибе, межслойном сдвиге и ударной вязкости по Шарпи, измерена плотность образцов углепластиков. Установлено, что предельная деформация образца модифицированного углепластика на основе связующего ЭТ-4 и углеродной ткани Урал Т-15Р возрастает с 6,51% до 9,04% при сжатии в сравнении с углепластиком УГЭТ. Модуль упругости при сжатии снижается с 4,27 ГПа до 3,60 ГПа. Ударная вязкость по Шарпи в 2 раза превышает показатели УГЭТ.

В рамках лабораторных триботехнических испытаний исследованы зависимости коэффициента трения и величины линейного изнашивания от контактного давления с контртелами 20Х13 и оксидированного титанового сплава ПТ-3В в условиях смазки водой. Доказано уменьшение коэффициента трения и величины линейного изнашивания модифицированного углепластика на основе связующего ЭТ-4 и углеродной ткани Урал Т-15Р.

Представлены результаты испытаний опытных образцов подшипников скольжения модифицированного углепластика, проведенных в центре исследований и испытаний завода ЛМЗ, АО «Силловые машины», на стенде испытания втулок направляющего аппарата «СМ», имитирующих условия работы механизма поворота лопаток гидротурбин.

1. Бахарева В. Е. Современные машиностроительные материалы. Неметаллические материалы. Справочник / Под ред. И. В. Горынина. – СПб.: НПО «Профессионал», 2014. – С. 79-133.
2. Николаев Г. И., Бахарева В. Е., Власов В. А., Лобынцева И. В., Анисимов А. В., Петрова Л. В., Сими́на В. Н. Применение антифрикционных углепластиков в подшипниках скольжения // Вопросы материаловедения. – 2006. – Т. 79, №5. С. 705-716.
3. Мустафа Л.М., Исмаилов М.Б., Ермаханова А.М., Санин А.Ф. Исследование влияния пластификаторов и термопластов на механические свойства эпоксидной смолы и углепластика (Обзор) // Комплексное использование минерального сырья (Complex Use of Mineral Resources). – 2019. – №4 (311). – С. 48-56. <https://doi.org/10.31643/2019/6445.37>
4. Гинзбург Б. М., Точильников Д. Г., Бахарева В. Е., Анисимов А. В., Киреев О. Ф. Полимерные материалы для подшипников скольжения, смазываемых водой (Обзор) // Журнал прикладной химии. – 2006. – Т. 79, №5. – С. 705-716.

Перспективные способы наплавки антикоррозионных покрытий при изготовлении оборудования АЭУ с водным теплоносителем

Г.Б. Фомин, И.А. Морозовская, М.Н. Тимофеев

E-mail: npk6@crism.ru

Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

При изготовлении корпусного оборудования АЭУ с водным теплоносителем на поверхности перлитных сталей выполняют наплавку антикоррозионного покрытия (АКП) материалами из стали аустенитного класса следующими способами: автоматическим электродуговым или электрошлаковым способом сварочной лентой под флюсом [1], ручным дуговым способом покрытыми электродами, аргонодуговым способом.

Ручной способ наплавки покрытыми электродами характеризуется низкой производительностью и нестабильным качеством наплавленного металла. Автоматический и полуавтоматический аргонодуговой способ наплавки плавящимся электродом позволяют повысить производительность сварочных работ, а также выполнять наплавку поверхностей сложной конфигурации в различных пространственных положениях в отличие от наплавки лентой под флюсом. В то же время при наплавке аргонодуговым способом плавящимся электродом в импульсном режиме обеспечивается меньшая глубина проплавления и соответственно меньшая доля участия основного металла в наплавленном, чем при наплавке аргонодуговым способом неплавящимся электродом с присадкой.

Рассмотрены следующие перспективные способы полуавтоматической аргонодуговой наплавки в смеси защитных газов плавящимся электродом: метод СМТ (Cold Metal Transfer) [2], аргонодуговая наплавка в импульсном режиме проволокой сплошного сечения и порошковой проволокой аналогичного состава.

Показано, что метод СМТ обеспечивает удовлетворительное качество наплавленного металла, однако сварочное оборудование для его использования является технологически сложным в обслуживании.

Применение полуавтоматической аргонодуговой импульсной наплавки плавящимся электродом проволокой марок Св-07Х25Н13 и Св-04Х20Н10Г2Б в смеси защитных газов позволяет получить наплавленный металл, по характеристикам идентичный металлу, наплавленному электродами марки ЗИО-8 и ЭА-898/21Б, что подтверждено приведёнными результатами испытаний. Проведены сравнительные исследования технологичности аргонодуговой импульсной наплавки с использованием в качестве плавящегося электрода порошковой проволоки отечественных и зарубежных производителей марки 309 (аналог Св-07Х25Н13) и 347 (аналог Св-04Х20Н10Г2Б) [3]. Отмечены высокая скорость наплавки, правильное формирование валиков с ровными краями и мелкочешуйчатой поверхностью, отсутствие брызг, полное отделение шлака от поверхности наплавленного валика. Установлено, что стабильный химический состав наплавленного металла обеспечивается при толщине 4 мм.

1. М. Н. Тимофеев, И. А. Морозовская, С. Н. Галяткин / Исследование коррозионно-стойких наплавочных покрытий оборудования АЭУ, выполненных ленточным электродом дуговым и электрошлаковым способами // Вопросы материаловедения № 105, 2021- с.94-106
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. М.В. Карасёв и др. / Особенности технологии производства и применения сварочных порошковых проволок для сварки в защитных газах// Тяжёлое машиностроение/ 1-2, 2021.18-27с.

Особенности формирования неразъемного соединения разноименного сочетания жаропрочных никелевых сплавов методом высокотемпературной пайки

И.А. Галушка¹

E-mail: 79686085853@yandex.ru

¹ НИИЦ «Курчатовский институт» – Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, Москва, Россия

В настоящее время, применение газотурбинных двигателей в качестве силовой установки для авиации, получило широкое распространение. Это стало возможным благодаря высокой энергоотдаче, компактности и малому весу в сравнении с другими типами силовых установок. Ключевым узлом, подверженным наибольшим нагрузкам, является соединение диска с лопатками турбины, которое работает в экстремальных условиях. Применение для его изготовления разноименного сочетания жаропрочных никелевых сплавов, позволит добиться наилучших показателей. Основной сложностью при выборе технологии получения неразъемного соединения разноименного сочетания жаропрочного деформируемого сплава, как материала для изготовления диска и литейного монокристаллического, как материала для изготовления лопаток, является высокое содержание γ' фазы в составе соединяемых материалов [1].

Целью данной работы исследование особенностей формирования структуры паяных соединений никелевых жаропрочных сплавов, разработка состава припоя и технологии пайки деформируемого и монокристаллического никелевых жаропрочных сплавов в разноименном сочетании применительно к изготовлению рабочего колеса турбины.

Для решения этой задачи разработан с применением компьютерного моделирования новый жаропрочный припой на никелевой основе, исследовано влияния режимов термической обработки на фазовый состав и микроструктуру паяных соединений, установлены условия формирования паяной зоны с полным изотермическим отверждением и микроструктуры, обеспечивающей наилучшие прочностные свойства паяного соединения [2].

Разработанная методика измерения основных зон паяного шва с получением набора уравнений для прогнозирования формирования основных фаз в паяном соединении. Определено уравнение нахождения минимальной длительности выдержки при гомогенизационной термической обработке, исходя из заданной величины сборочного зазора с целью формирования оптимальной микроструктуры паяного шва с полным изотермическим отверждением припоя, обеспечивающей длительную 100 часовую прочность соединений при 850°C на уровне 0,8-0,9 от прочности соединяемых материалов [3].

1. Оспенникова О.Г., Лукин В.И., Афанасьев-Ходыкин А.Н., Галушка И.А. «Изготовление конструкции типа "блиск" из разноименного сочетания материалов (обзор)» // Труды ВИАМ. 2018. №10 (70).
2. Оспенникова О.Г., Афанасьев-Ходыкин А.Н., Галушка И.А. «Исследование особенностей формирования микроструктуры паяного соединения разноименных никелевых жаропрочных сплавов, выполненных сложнолегированным многокомпонентным припоем» // Труды ВИАМ. 2021. №1 (95).
3. Оспенникова О.Г., Лукин В.И., Афанасьев-Ходыкин А.Н., Галушка И.А. «Технология высокотемпературной диффузионной пайки конструкции типа "блиск" из разноименных сплавов» // Труды ВИАМ. 2019. №9 (81)

**Выбор перспективных систем легирования материалов для сварки
коррозионностойкой стали аустенитного класса повышенной прочности
для АЭС малой мощности**

И.С. Григорьев¹, Ю.В. Семенов¹, М.Н. Тимофеев¹

E-mail: nrk6@crism.ru

*Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им.
И. В. Горькина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Представлены результаты работ по созданию сварочного материала, обеспечивающего равнопрочность сварного соединения новой коррозионностойкой стали аустенитного класса повышенной прочности, применяемой при изготовлении деталей теплообменного оборудования атомных станций малой мощности.

Показано влияние химических элементов Mo, Nb, Mo-Nb, Mo-V в наплавленном металле типа Fe-18Cr-10Ni-1.4Mn на предел прочности и текучести при температурах 20 °С и 350 °С [1,2].

Выбраны 3 перспективных систем легирования наплавленного металла типа Fe-18Cr-10Ni-1.4Mn: 2.2Mo-V-Nb, 2.2Mo-V-W и 2.5Mo-Nb-N.

Приведены первичные результаты испытаний на прочность наплавленного металла новых перспективных систем. Результаты соответствуют требованиям, предъявляемым к новой коррозионностойкой стали аустенитного класса повышенной прочности.

1. НП-104-18. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Сварка и наплавка оборудования трубопроводов атомных энергетических установок. – М., 2018. – 70 с.
2. НП-105-18. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Правила контроля металла оборудования трубопроводов атомных энергетических установок при изготовлении и монтаже. – М., 2018. – 97 с.

А.А. Ханнанов¹, А.Е. Бурматова¹, Д.А. Балькаев¹, К.С.Зимин¹, ¹, М.П. Кутырева¹

E-mail: arthann@gmail.com / aahannanov@kpfu.ru

¹Казанский Федеральный Университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

Полиольный метод является одним из наиболее перспективных и экологически чистых подходов к одностадийному синтезу наночастиц металлов контролируемой формы и размера. Преимуществом полиольного процесса получения наночастиц является возможность получения как монометаллических наночастиц, так и наночастиц сплавов. Использование высокомолекулярного полиола может значительно расширить и улучшить свойства получаемых нанокомпозитов. Наиболее перспективны в данном направлении дендритоподобные сверхразветвленные полимеры (СРП). Значительное количество и высокая плотность гидроксильных групп в периферийном слое полимера могут обеспечить его высочайшую эффективность в качестве восстановителя наночастиц металлов. Трехмерная архитектура СРП в сочетании с плотной функциональной оболочкой делает их превосходными стабилизаторами металлических нанофаз.

Поэтому, для понимания процессов формирования нанофазы необходимо сопоставить механизмы формирования и свойства получаемых наночастиц с использованием полиолов разной архитектуры, но равной или близкой молекулярной массой.

В рамках данной работы были изучены сопоставлены механизмы полиольного восстановления наночастиц кобальта в матрице СРП Boltorn H30 (G-3) и линейного PEG 4000 (L-3), а также СРП Boltorn H40 (G-4) и PEG 6000 (L-4). Данные полиолы обладают одинаковой полиэфирной структурой и сопоставимой молекулярной массой, а отличаются только архитектурой. Во всех случаях синтез проходил с нагреванием до 220 °С со скоростью 10 °С/мин, для синтезов с G-3 и G-4 в качестве среды использовался ДМСО, для L3 и L4 растворители не использовались.

Соотношения полиол/Co²⁺ для G-3 составляло 1/500, 1/250 и 1/150. Изучение эволюции по данным анализа траекторий наночастиц (НТА) показывает, свидетельствует о дигестивном формировании наночастиц для G-3-Co-500, прямом Оствальдском для G-3-Co-250 и прямом Оствальдском для G-3-Co-150 механизме стабилизации. Для L-3 соотношение полиол/Co²⁺ составило 1/500, 1/100 и 1/10, что в пересчете на количество гидроксогрупп эквивалентно G-3, использование L-3 позволяет сразу получить стабильные наночастицы, однако в течении 14 дней наблюдается рост полидисперсности. Увеличение генерации до G-4 при тех же соотношениях, по данным НТА показывает дигестивный механизм созревания нанофазы, при этом наночастицы стабильны в течении 7 дней. Использование полиола L-4, приводит к постепенной стабилизации наночастиц в течении 7 дней, при прямом Оствальдском механизме для соотношения 1/500 и обратном для соотношений 1/100 и 1/10

Метод полиолиольного синтеза наночастиц удобен для получения композиционных материалов методом экструзии. В рамках данного проекта были получены композиты, содержащие от 0,5% до 20 % L-4-Co композитов. Показано что введение данных композитов не оказывает негативного влияния на эксплуатационные характеристики и придает полимеру свойства магнитной восприимчивости.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-73-10036

1. Kutyreva, M.P. High-Temperature Synthesis of Cobalt Nanoparticles in Hyperbranched Polyester Polyol Medium / M.P. Kutyreva, A.E. Burmatova, A.A. Khannanov, V.G. Evtugin // Russ. J. Gen. Chem. – 2022. – V. 92. – № 12. – P. 2838-2844.
2. Burmatova, A. A Hyperbranched Polyol Process for Designing and Manufacturing Nontoxic Cobalt Nanocomposite / A. Burmatova, A. Khannanov, A. Gerasimov, K. Ignateva, E. Khaldeeva, A. Gorovaia, A. Kiiamov, V. Evtugyn, M. Kutyreva // Polymers – 2023. – V. 15. – № 15. – Reg. 3248. doi:10.3390/polym15153248

Определение оптимальных параметров высокоскоростной термомеханической обработки хромоникельмолибденовой стали на основании имитационного моделирования

Н.А. Кондратьев¹

E-mail: npk3@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

С каждым годом в различных отраслях промышленности растет потребность в производстве высокопрочного листового проката небольших толщин, в том числе и в судостроении. С повышением прочности снижается металлоемкость сварных конструкций: корпусов судов и кораблей, стрел грузоподъемных судостроительных и автокранов, траверсов и т.д. Поэтому появилась необходимость в создании листов малых толщин (5-9 мм) из хладостойкой стали с пределом текучести 590 МПа и выше.

Листовой прокат толщиной от 5 до 9 мм изготавливается на непрерывных станах горячей прокатки, а возможности его термической обработки обычно отсутствуют. Преимущественной технологией для получения высокопрочного листового проката на таких станах является термомеханическая обработка с ускоренным охлаждением и сомоткой в рулон. Основными технологическими параметрами, определяющими свойства горячекатаной стали бейнитного класса, наряду с химическим составом, являются температура конца чистовой прокатки, скорость охлаждения в установке ламинарного типа и температура сомотки рулонного проката [1-4].

Цель работы заключалась в исследовании влияния условий горячей деформации и охлаждения на формирование структуры хромоникельмолибденовой стали бейнитного класса при имитации режимов прокатки на непрерывном стане.

Было проведено исследование влияния скорости деформации, а также микролегирующих добавок на фазовые превращения. С увеличением скорости деформации от 0,01 до 10 с⁻¹ в аустенитной области для Cr-Ni-Mo стали, микролегирующей ниобием и ванадием, повышаются температуры начала и конца бейнитного превращения и сдвигаются влево на ТКД область ферритного, что приводит к снижению доли структур реечной морфологии. При микролегировании хромоникельмолибденовой стали ниобием (по сравнению с ванадием) повышаются температуры начала и конца бейнитного превращения на 34 и 23 °С соответственно после охлаждения со скоростями 20-30 °С/сек, способствуя повышению доли гранулярного бейнита.

С помощью имитационного моделирования на деформационном дилатометре DIL 805 установлены температуры начала динамической рекристаллизации (1050-1100 °С) при высоких скоростях деформации, а также определены оптимальные температуры сомотки (500-550 °С), позволяющие получить близкие структурные составляющие после охлаждения со скоростями 0,07 и 0,025 °С/с, характерными для охлаждения внешних и внутренних витков рулона, с развитым субзерненным строением с характерным размером 4-5,8 мкм (при угле толерантности 5°).

1. J. Kong and C. Xie. Effect of molybdenum on continuous cooling bainite transformation of low-carbon microalloyed steel / *Materials and Design*. – Volume 27. – Issue 10. – 2006. – p. 1169-1173.
2. T. Suzuki, Y. Ono, G. Miyamoto and T. Furuhashi. Effects of Si and Cr on bainite microstructure of medium carbon steels / *ISIJ International*. – Volume 50. – Issue 10. – 2010. – p. 1476-1482.
3. S.J. Kim, C. G. Lee, T.H. Lee and S. Lee. Effects of coiling temperature on microstructure and mechanical properties of high-strength hot-rolled steel plates containing Cu, Cr and Ni / *ISIJ International*. – Volume 40. – May, 2000. – p. 692-698.
4. V.S.A. Challa, W.H. Zhou, R.D.K. Misra, R.O'Malley, S.G. Jansto. The effect of coiling temperature on the microstructure and mechanical properties of a niobium–titanium microalloyed steel processed via thin slab casting / *Materials Science and Engineering: A*. – № 595. – 2014. – p. 143-153.

Формирование кристаллографической текстуры высокопрочной бейнитной стали при закалке с прокатного нагрева

К.Ю. Куртева¹, Е.А. Яковлева¹

E-mail: npk3@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Для надежной эксплуатации конструкций из высокопрочной судостроительной стали, к данным сталям предъявляются особые требования по одновременному обеспечению высокой прочности, пластичности и холодостойкости [1]. Ранее было установлено, что требуемый уровень прочности и холодостойкости достигается за счет формирования дисперсной изотропной по толщине листа бейнитно-мартенситной структуры. Формирование дисперсной бейнитно-мартенситной структуры происходит благодаря измельчению аустенитного зерна в результате статической рекристаллизации, протекающей в паузах между проходами на высокотемпературной стадии деформации [2]. Однако остается неизученным влияние горячей пластической деформации на состояние аустенита и формирование конечной структуры стали на финальной стадии прокатки, где отсутствуют процессы рекристаллизации.

Целью работы являлось исследование влияния различных режимов горячей пластической деформации на финальной стадии прокатки перед ускоренным охлаждением на формирование кристаллографической текстуры и механических свойств высокопрочной бейнитной стали.

Объектом исследования является листовой проката толщиной 18 мм из бейнитной стали марки 09ХН2МД, изготовленный с применением технологии закалки с прокатного нагрева и последующего высокого отпуска по трем различным режимам деформации на финальной стадии прокатки.

Для исследования механических свойств листового проката были проведены испытания на осевое растяжение. Кристаллографическая текстура и микроструктура стали исследовались методом EBSD и оптической металлографии соответственно. Анализ EBSD данных позволил более точно установить морфологию бейнитной фазы и состояние аустенита перед ускоренным охлаждением в зависимости от режима горячей деформации.

Показано, что для формирования структуры более прочного (реечного) бейнита необходимо контролировать наклеп аустенита перед ускоренным охлаждением, чему способствует снижение степени среднего относительного обжатия на финальной стадии деформации. Увеличение наклепа аустенита перед ускоренным охлаждением приводит к формированию бейнита гранулярной морфологии и, как следствие, снижению прочностных характеристик стали при сохранении вязкопластических.

Таким образом, установлено, что увеличение наклепа высокотемпературной фазы перед ускоренным охлаждением повышает температуру γ - α превращения, что позволяет контролировать структуру и свойства в листовом прокате из высокопрочной бейнитной стали в разных толщинах с помощью применения различных схем горячей пластической деформации.

1. Рыбин В.В., Малышевский В.А., Хлусова Е.И. Высокопрочные свариваемые улучшаемые стали-СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2016- 212 с.
2. Хлусова Е.И., Сыч О.В., Орлов В.В. Хладостойкие стали. Структура, свойства, технологии // Физика металлов и металловедение, 2021 Т. 122, №6, С. 621-657

Влияние лазерного излучения на рост наноразмерного компонента WC в системе Ni-Ti-WC

А.М. Макаров¹, Д.А. Геращенко¹, В.В. Бобырь¹, А.А. Каширина¹

E-mail: npk3@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Метод лазерной закалки занял особую нишу в современном машиностроении благодаря своей локальности и скорости процесса. Однако данный метод может улучшить физико-механические свойства изделия лишь до некоего предела, поэтому в НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» предложено наносить слой 200-300 мкм из монометаллических порошков и затем локально обрабатывать лазерным лучом [1]. В результате лазерной обработки на поверхности изделия образуется ванна расплава, внутри которой происходит образование интерметаллида за счет перемешивания материала покрытия и подложки. Также существуют работы, в которых показано, что при введении нанопорошков карбидов (WC, TaC, NiC, VC и др.) в исходную механическую смесь увеличивается износостойкость покрытия [2]. Таким образом авторам [3] удалось соединить два этих подхода при получении износостойкого покрытия системы Ni-Ti-WC, однако был замечен рост наноразмерных включений, что негативно сказывается на микротвердости изделия, а значит не полностью раскрывает потенциал предложенной технологии.

Целью данной работы было изучение влияния параметров лазерной обработки на структуру, микротвердость, химический и фазовый составы покрытий системы Ni-Ti-наноWC

В работе выявлены закономерности влияния режимов лазерной обработки системы Ni-Ti-наноWC на свойства и структуру покрытий. Установлено повышение микротвердости до 1200 HV в результате лазерной обработки покрытий системы Ni-Ti-наноWC за счет образования ромбовидных включений WC размером до 250 нм.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ №21-73-30019

1. Геращенко Д.А. Создание и исследование интерметаллидного покрытия системы Ni-Ti, армированного карбидом вольфрама, для повышения износостойкости титанового сплава / Д. А. Геращенко, А. А. Ивановский, А. М. Макаров, С. Ю. Евдокимов // Вопросы материаловедения. – 2022. – № 4(112). – С. 50-61.
2. Бирюков В.П. Влияние нанокарбидов тугоплавких металлов на трибологические свойства покрытий при лазерной наплавке / В.П. Бирюков, В.Н. Петровский, М.А. Мурзаков, А.А. Фишков // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2015. – № 6. – С. 70-74.
3. Makarov A.M. Study of the method of obtaining functional interest-metallic coatings based on Ni-Ti reinforced with WC nanoparticles / A.M. Makarov, D.A. Gerashchenkov, M.A. Markov [и др.] // Key Engineering Materials. – 2019. – №. 822. – С. 760-767.

Оценка антирадикальных свойств фуллеренола в облученных ускоренными электронами растворах

М.А. Маркова¹, А.В. Титова², Ж.Б. Лютова^{1,2}

Email: markovam50@gmail.com

¹Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург

²Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина

Как известно, в ходе клеточного метаболизма протекают взаимосвязанные окислительно-восстановительные реакции, в ходе которых образуются активные формы кислорода (АФК) и азота (АФА). Как АФК, так и АФА являются естественными продуктами клеточной активности и основными участниками в передаче клеточных сигналов [1]. Но под воздействием патогенных факторов нарушается количественный баланс между свободнорадикальными частицами и естественными антиоксидантными ферментами, что приводит к нежелательному повреждению клеточных структур. Актуальность создания эффективных препаратов для инактивации избыточного количества таких активных форм возрастает по мере более широкого применения методов ядерной медицины и ухудшения экологической обстановки.

Радиационная стерилизация, как заключительная стадия производства лекарственных препаратов, является эффективным и экономически обоснованным методом. Для подтверждения возможности применения данной технологии в каждом отдельном случае требуется детальное научное исследование влияния радиолитиза на фармацевтические субстанции.

Фуллеренолы благодаря большой системе частично сопряженных двойных связей, признаны эффективными антиоксидантами [2]. Данная работа посвящена изучению влияния воздействия ускоренных электронов на антирадикальную активность фуллеренолов со средней степенью гидроксильности.

Облучение водных растворов фуллеренола $C_{60}(OH)_{20\pm 2}$ в диапазоне концентраций 10-200 мкг/мл было проведено на линейном ускорителе электронами с энергией 5 МэВ. Диапазон поглощенных доз отвечал рекомендациям, представленным в общей фармакопейной статье «Стерилизация» № ОФС.1.1.0016.15, и составил 10-25 кГр.

Антирадикальные свойства фуллеренола $C_{60}(OH)_{20\pm 2}$ оценивались по их способности взаимодействовать со стабильными свободными радикалами α, α -дифенил- β -пикрилгидразида, супероксидными анион-радикалами (реакция аутоокисления адреналина), гидроксильными радикалами (фентоноподобная система, основанная на окислительно-восстановительном цикле Cr^{3+}/Cr^{6+} с H_2O_2).

Проведенное исследование показывает, что под воздействием стерилизующих доз ионизирующего излучения фуллеренол $C_{60}(OH)_{20\pm 2}$ не теряет своих антирадикальных свойств и может использоваться как антиоксидант в фармацевтической промышленности.

1. Finkel T. // Curr. Biol. 1998. Vol. 10. P. 248–253.

2. Zhang T. et al. Fullerenols Mitigate Radiation-Induced Myocardial Injury // Advanced Healthcare Materials. – 2023. – С. 2300819.

Изучение влияния ионизирующего излучения на структурные и электрохимические свойства протонообменной мембраны

С.В. Нагорный^{1,2}, Б.В. Иванов², М.В. Синяков^{1,2}, Д.Д. Спасов^{2,3}, Р.М. Меншарапов², Н.А. Иванова²
E-mail: nagornyy126@yandex.ru

¹Российский Химико-Технологический университет им. Д.И. Менделеева, кафедра технологии изотопов и водородной энергетики, Москва, Россия

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

³Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, Россия

Электрохимические устройства эффективно применяются в топливном цикле ядерных и термоядерных установок разделения изотопов водорода, например, концентрирование радиоактивного изотопа водорода, трития, осуществляется СЕСЕ-процессом, в котором в качестве нижнего узла обращения потоков используется электролизер на основе протонообменной мембраны (ПОМ) [1].

Еще одной технологией, которая эффективно внедряется в топливные циклы термоядерных реакторов, например, ИТЕР, является электрохимический водородный насос (ЭВН) на основе ПОМ. Данное электрохимическое устройство позволяет проводить извлечение, очистку и компримирование водорода в газовой фазе [2]. Использование ЭВН в топливном цикле ТЯР, как и СЕСЕ-процесса для очистки воды от трития, приводит к необходимости дополнительных исследований влияния ионизирующего излучения (ИИ) на ПОМ из-за деградиационных процессов, происходящих в структуре полимера. Изменение структуры полимера может приводить к снижению механических и электрохимических свойств мембраны [3].

В данном докладе представлены результаты исследований структурных, электрохимических и физико-химических свойств облученной мембраны Aquivion® E98-15S. Облучение проводилось на установке РС-20, ток электронного пучка составил 75 кА, энергия электронов ~ 1 МэВ, поглощенная доза ионизирующего излучения ~ 50 Гр. Изучение структурных свойств ПОМ проводилось методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Также были определены такие физико-химические свойства, как влагоемкость, удельная проводимость и термостабильность полимера. В результате испытаний электрохимических свойств были получены вольтамперные характеристики ЭВН с облученной ПОМ при температуре 30-50°C и давлении водорода в анодном пространстве 0.03 и 0.1 МПа.

По итогам исследования и сравнения свойств облученной и стандартной (необлученной) ПОМ можно сделать выводы о нарушении водного баланса в объеме мембраны при повышенных температурах, увеличении размеров водных каналов и возникновении более выраженной температурной зависимости протонпроводения. Данные эффекты наблюдаются вследствие частичного разрушения связей в перфторированном скелете полимера, а также отрыва сульфогрупп и образования новых кислотных групп (-COOH и -OH) в водных каналах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-29-01367

1. C. J. Sienkiewicz и J. E. Lentz, «Recovery of Tritium from Water», Fusion Technol., т. 14, вып. 2P2A, сс. 444–449, сен. 1988, doi: 10.13182/FST88-A25172.
2. Иванов Б. В. и др. О возможности применения электрохимического водородного насоса в топливном цикле ТЯР //ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. – 2022. – Т. 45. – №. 4. – С. 105.
3. Fox E. B., Greenway S. D., Clark E. A. Radiation stability of nafion membranes used for isotope separation by proton exchange membrane electrolysis //Fusion Science and Technology. – 2010. – Т. 57. – №. 2. – С. 103-111.

Создание библиотеки цифровых двойников конструкционных материалов***Е.Д. Назарова, М.М. Пегливанова, Д.Р. Бараков, В.Ю. Филин, А.В. Ларионов***

Email: Nazarova@crism.ru

Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Для проведения численных расчётов напряженно-деформированного состояния металлоконструкций в упругопластической постановке возникает необходимость задавать «истинную» диаграмму деформирования материала – зависимость интенсивности напряжений σ от интенсивности деформаций ε . Исходной информацией является результат испытания образца на одноосное растяжение, однако за пределами равномерной деформации необходимо обоснованное применение аппроксимаций. Авторы воспользовались идеей Абакумова и др. [1], предложивших использовать цифровую модель исходного образца на растяжение для проверки таких аппроксимаций.

Разработана пошаговая процедура создания «истинных» диаграмм [2], начальный участок которых в пределах равномерной деформации отражает особенности экспериментальных диаграмм нагружения (наличие физического предела текучести и плато Людерса), далее принимается трехпараметрическая аппроксимация вида

$$\sigma = A \times (E (\varepsilon + C) / A)^B. \quad (1)$$

Параметры в формуле (1) на первом шаге подбора определяются следующим образом: A равно пределу упругости, $B = n$ – коэффициенту деформационного упрочнения, $C = 0$. Для достижения нужной кривизны аппроксимации в месте касания с начальным участком диаграммы варьируются параметры B и C , при этом сохраняется примерное соотношение $B - C = n$. Увеличение C снижает кривизну аппроксимации в точке касания. Само касание осуществляется последующим подбором параметра A .

Авторами предложен способ интегрального учета изменения свойств металла при динамическом нагружении, это позволило создать библиотеку «истинных» диаграмм деформирования сталей с пределом текучести от 300 до 900 МПа как при статических, так и при ударных нагрузках. Разработанные цифровые двойники используются для анализа критериев вязкого и хрупкого разрушения [3]. Планируется упростить процесс добавления новых материалов в библиотеку за счет автоматизации первичной обработки диаграммы.

1. Абакумов А.И., Сафронов И.И., Смирнов А.С., Арабей А.Б., Есиев Т.С., Яковлев С.Е., Порошков А.В., Обыденнов Е.Н. Расчетно-экспериментальное исследование испытания падающим грузом высокопрочной трубной стали X100 (K80) // Проблемы прочности и пластичности, т. 83, № 3, 2021. DOI: 10.32326/1814-9146-2021-83-3-354-368.
2. Пегливанова М.М., Назарова Е.Д., Филин В. Ю. Сравнение оценок удлинения образцов на растяжение разной кратности // XXIII Зимняя школа по механике сплошных сред Пермь, 13-17 февраля 2023г, тезисы докладов – Пермь: ПФИЦ УрО РАН, 2023г., с.264.
3. Филин В.Ю., Мизецкий А.В., Назарова Е.Д. Определение критических температур хрупкости стали на базе численного моделирования испытаний образцов Шарпи/ Физико-механические испытания, прочность и надежность современных конструкционных и функциональных материалов: материалы XIV Всероссийской конференции по испытаниям и исследованиям свойств материалов «ТестМат» (г. Москва, 25 марта 2022 г.), [Электронный ресурс] / НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ. – М.: НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ, 2022. – 540 с., с. 320-332.

Влияние микролегирования на особенности структурообразующих процессов при горячей пластической деформации в ферритно-бейнитных и бейнитно-мартенситных сталях

Н.С. Новоскольец¹, О.В. Сыч¹, С.В. Коротовская¹

E-mail: npk3@crism.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Многолетний опыт создания отечественных конструкционных сталей говорит о том, что обеспечить высокий уровень механических свойств и характеристик работоспособности листового проката позволяет получение мелкозернистой однородной структуры [1,2]. Вне зависимости от используемой технологии производства горячекатаного листового проката из судостроительных марок стали основным способом получения дисперсной структуры является сдерживание роста зерна аустенита при нагреве с последующим измельчением его при высокотемпературной деформации за счет протекания процессов рекристаллизации. Размер аустенитного зерна при нагреве зависит от содержания в химическом составе карбо- и нитридообразующих металлов (титан, ниобий и ванадий) [3], которые также оказывают влияние на прохождение динамической (ДР) и статической рекристаллизации (СР) [4].

Целью работы являлось исследование влияния микролегирования на протекание структурообразующих процессов в высокотемпературной γ -фазе (аустените) судостроительных хладостойких сталей различных композиций легирования.

Влияние микролегирования на процессы структурообразования при нагреве под прокатку оценивалось по изменению размера зерна аустенита в зависимости от температуры нагрева на образцах после вакуумного травления, выполненного на дилатометре DIL 805. Средний размер аустенитных зерен был определен на оптическом микроскопе МЕИЛ TECNO IM 7200 с помощью программного обеспечения «Тиксомет» методом подсчета пересечений секущих концентрических окружностей с границами аустенитных зерен. Оценка влияния микролегирования на температурно-деформационные параметры протекания рекристаллизационных процессов при горячей деформации проводилось на термопластическом симуляторе «Gleeble 3800». Исследование ДР проводилось методом однократного изотермического сжатия. Исследование СР проводилось методом релаксации напряжений.

Выполненные исследования роста аустенитного зерна позволили определить оптимальные температуры нагрева под прокатку в промышленных условиях, при которых формируется наиболее однородная мелкодисперсная структура в ферритно-бейнитных и бейнитно-мартенситных сталях с различным микролегированием.

Определение параметров протекания СР и ДР позволило разграничить температурно-деформационные области действия структурообразующих процессов в высокотемпературной γ -фазе при горячей пластической деформации и разработать промышленные режимы прокатки судостроительных хладостойких сталей широкого спектра прочности.

1. Бернштейн М.Л., Займовский В.А., Капуткина Л.М. Термомеханическая обработка стали // М.: Металлургия, 1983. 480 с.
2. Эфрон Л.И., Литвиненко Д.А. Получение высокопрочных свариваемых сталей с бейнитной структурой с применением термомеханической обработки // Митом. 1994. №10. С. 28-32.
3. Одесский П.Д., Смирнов Л.А.. О применении ванадия и ниобия в микролегированных сталях для металлических конструкций// Сталь. 2005. №6. С. 116-123.
4. Opiela M., Ozgovicz W. Effects of Nb, Ti and V on recrystallization kinetics of austenite in microalloyed steels // Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering. 2012. No 55/2. P. 759-771.

УДК: 66-5

Увеличение производительности процесса сварки трением с перемешиванием методом вариации геометрической формы инструмента

Н.А. Опарин, Е.А. Алифиренко, А.Е. Демченко, В.Е. Никулин

Email: prek129@crism.ru

Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Методом сварки трением с перемешиванием (СТП) изготавливают сварные крупногабаритные облегченные панели (СКО-панели) для строительства корпусных и надстроечных конструкций морской и речной техники взамен цельнопрессованных панелей. Применение СКО-панелей обусловлено возможностью сварки длинномерных панелей неограниченной ширины и толщины от 2 мм с высокими прочностными характеристиками сварного соединения с малыми отклонениями по форме. СКО-панели позволяют повысить технические характеристики судов и другой морской техники [1,2].

Для увеличения объемов производства СКО-панелей из сплава Al-Mg принципиально необходимо повышение производительности сварки путём увеличения скорости СТП. Скорость сварки является одним из основных параметров, которые определяют режим пластического течения металла. Для её увеличения необходима корректировка основных параметров режима сварки, в том числе геометрии инструмента.

В данной работе при сварке СТП пластин Al-Mg сплава 1565ч проведено экспериментальное исследование сварочных инструментов различной геометрической формы, полученных методом селективного лазерного спекания (СЛС). СТП производили на заданных скоростях сварки, для которых производилось соответствующее им регулирование основных параметров процесса совместно с варьированием геометрии формы инструмента.

Удалось добиться скорости сварки до 2500 мм/мин соответствующей корректировкой режима и в том числе геометрии инструмента. Установлена оптимальная геометрическая форма инструмента, которая позволяет добиться эффективного течения пластифицированного металла. По результатам механических испытаний по ГОСТ 6996 коэффициент прочности при статическом растяжении стыковых соединений составил не менее 0.95, также как и на скоростях до 1000 мм/мин.

Данные результаты подтверждают возможность применения сварочных инструментов различной геометрической формы для СТП СКО-панелей с целью увеличения скорости и производительности процесса.

1. Алифиренко Е.А., Шишенин Е.А. Перспективы снижения веса корпусных и надстроечных конструкций при использовании сварных крупногабаритных облегченных панелей, полученных методом сварки трением с перемешиванием / труды Крыловского государственного научного центра. 2019. С. 49-52.
2. Алифиренко Е.А., Барахтина Н.Н., Малов Е.В. Создание новых сварных крупногабаритных облегченных панелей повышенной прочности из алюминиево-магниевых сплавов для строительства скоростных судов нового типа для эксплуатации в условиях заполярья / Вопросы материаловедения. 2021. № 3 (107). С. 263-273.

Мембранные материалы на основе полимеризованного метиленового зеленого

И.А. Прихно, М.А. Комкова, А.А. Елисеев

E-mail: ivan_prikhno@mail.ru

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

Мембранное газоразделение как альтернатива классическим ректификационным процессам позволяет снизить затраты энергии на процессы разделения различных углеводородных смесей на компоненты. Электрополимеризация различных феназиновых красителей является методом получения сверхтонких полимерных пленок [1]. Жесткая структура получаемых полимеров, сходная со структурой известных полимеров типа РИМ-1 [2], позволяет надеяться на высокую селективность мембран на основе данных полимеров по конденсируемым газам. Наличие у таких полимеров редокс-активности делает возможным разработку на их основе смарт-мембран с управляемыми приложением потенциала транспортными характеристиками.

Для получения мембранных материалов был применен метод электрополимеризации мономера – метиленового зеленого – на газопроницаемую проводящую подложку из анодного оксида алюминия (диаметр пор 40 нм) с напыленным на поверхности проводящим слоем золота. Электрополимеризацию проводили в режиме циклической вольтамперометрии от -0,5 до 1,3 В относительно хлорсеребряного электрода сравнения в слабощелочной среде (боратный буфер, рН=9). Варьированием скорости развертки потенциала и количества циклов контролировали соответственно пористость и толщину полимерного селективного слоя.

Исследована зависимость концентрации электроактивных групп от параметров синтеза полимера. Микрофотографии, полученные методом ПЭМ, демонстрируют низкую толщину селективного слоя – до 100 нм. Продемонстрирована высокая селективность полученных материалов по конденсирующимся газам: был достигнуты идеальные факторы разделения н-бутан/метан 73 и вода/азот 160. Обнаружена связь между селективностью газоразделения на исследованных мембранных материалах и сорбционными характеристиками данных материалов в виде существенно более высоких значений растворимости н-бутана, что свидетельствует о капиллярно-конденсационном механизме транспорта.

Показана возможность управления свойствами мембраны путем приложения к ней электрического потенциала. Переключение приложенного к полимерному материалу потенциала от +0,2 до -0,2 В меняет его проницаемость по воде практически вдвое. Проведена характеристика электрохимической активности полиметиленового зеленого при различных рН раствора электролита с помощью *in situ* спектроскопического исследования методом КР-спектроскопии. Проведено сравнение полиметиленового зеленого с известным редокс-активностью полианилином.

Таким образом, в рамках данной работы изучены новые ранее не описанные в литературе мембранные материалы. Возможными сферами их применения являются управляемая осушка различных газов или же мембранное газоразделение.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 23-13-00195

1. Karyakin A.A., Karyakina E.A., Schmidt H.-L. Electropolymerized Azines: A New Group of Electroactive Polymers // *Electroanalysis: An International Journal Devoted to Fundamental and Practical Aspects of Electroanalysis*. 1999. Т. 11. № 3. С. 149-155.
2. Chernova E. et al. Enhanced gas separation factors of microporous polymer constrained in the channels of anodic alumina membranes // *Scientific reports*. 2016. V. 6. No. 1. P. 31183-31190.

Однофазный синтез нанокомпозитов на основе наночастиц серебра и функционализированных сверхразветвленных полиэфиров

В.А. Прытков, А.М. Осипова, А.А. Ханнанов, И.В. Кузнецов, М.П. Кутырева

E-mail: vaaprytkov@gmail.com

Казанский Федеральный Университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

Металлополимерные композитные наноматериалы являются перспективными объектами для медицины и фармакологии в качестве основы для создания многофункциональных терапевтических агентов или агентов для тераностики [1]. Интерес представляет включение в состав данных материалов наночастиц биофильных металлов, обладающих выраженной антибактериальной активностью, а именно наночастиц серебра [2]. Использование полимеров, обладающих и стабилизирующей, и восстановительной активностью по отношению к ионам благородных металлов, делает возможным отказ от использования дополнительных восстановителей, что позволит повысить чистоту наноматериала, снизить токсичность, контролировать морфологию и функциональную активность композитного наноматериала. Для этих целей могут быть успешно применены нетоксичные биodeградируемые дендритоподобные сверхразветвленные полиэферы (СПП), функционализированные аминными или карбоксильными фрагментами.

В рамках работы был проведен синтез функционализированных производных сверхразветвленных дендритоподобных полиэфиров второй генерации, содержащих 3[(2-аминоэтил)амино]пропионатом – G2-EDA (содержание аминогрупп 14.7 ± 0.2 %масс) и фрагментами моноэфира малеиновой кислоты – G2-estMA (содержание карбоксильных групп 19.7 ± 0.1 %масс). Синтезированные сверхразветвленные полимеры были использованы для синтеза нанокомпозитов, допированных наночастицами серебра.

Был разработан метод одностадийного синтеза нанокомпозитов состоящего из наночастиц серебра включенных в наноразмерные полимерные агрегаты G2-EDA и G2-estMA в водной среде. В качестве соли-предшественника был использован $AgNO_3$. Было установлено, что данные СПП выступают и в роли восстановителя, и в роли стабилизатора наночастиц серебра: G2-EDA - в стандартных условиях, G2-estMA - в условиях термо- (при 60 – 90 °C) и фотоинициации (при 254 и 365 нм). По данным УФ-Вид и ИК спектроскопии оценены процессы формирования наночастиц серебра в полимерных ассоциатах. Оценено влияние мольных отношений $\nu_{Ag^+}:\nu_{EDA}$ и $\nu_{Ag^+}:\nu_{MA}$, а также способа инициации на морфологию и скорость образования частиц. Методом NTA изучена агрегационная активность нанокомпозитов, оценены концентрации и гидродинамические диаметры металлополимерных агрегатов. По данным ПЭМ были оценены морфология и распределение частиц по размерам.

Синтезированные нанокомпозитные составы, содержащие наночастицами серебра, обладают плазмонной активностью и потенциалом применения в медицине, как тераностические агенты с антибактериальной активностью.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета “Приоритет-2030”. Морфология поверхности синтезированных наночастиц была оценена методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на оборудовании Междисциплинарного центра “Аналитическая микроскопия” Казанского федерального университета

1. Fu X. et al. Silver-dendrimer nanocomposite as emerging therapeutics in anti-bacteria and beyond // Drug Resistance Updates. 2023. V. 68. P. 100935.
2. Vishwanath R. et al Conventional and green methods of synthesis of silver nanoparticles and their antimicrobial properties // Current Research in Green and Sustainable Chemistry. 2021. V. 4. P. 100205.

Разработка технологии автоматической наплавки под флюсом, обеспечивающей низкую долю участия основного металла

Р.И. Самойленко, М.Н. Тимофеев

E-mail: nprk6@crism.ru

Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

При изготовлении оборудования энергетических установок широко применяют переходные и антикоррозионные наплавки. Автоматическая дуговая сварка под флюсом, являясь наиболее производительным способом выполнения таких наплавов, имеет ограничение в связи с высокой долей участия основного металла (30—40 %), что требует увеличения высоты наплавки для обеспечения стабильности химического состава и свойств металла наплавки [1].

В работе приведены результаты исследования влияния параметров автоматической сварки под флюсом на глубину проплавления и долю участия основного металла.

В результате исследований разработаны технологические параметры автоматической сварки под флюсом, позволяющие снизить долю участия основного металла [2].

1. М.Н. Тимофеев, Г.П. Карзов, С.Н. Галяткин, Э.И. Михалева, С. Г. Литвинов. Повышение служебных характеристик металла монтажных сварных соединений транспортных атомных энергетических установок из теплоустойчивых сталей Часть 1: Технология сварки теплоустойчивых сталей углеродистыми сварочными материалами в условиях отсутствия термической обработки и опыт применения сварочных материалов // Вопросы материаловедения – 2017. № 4 (92). С. 131–139.
2. Тимофеев М.Н., Галяткин С.Н., Михалева Э.И. Повышение служебных характеристик металла монтажных сварных соединений транспортных атомных энергетических установок из теплоустойчивых сталей Часть 2. Исследование механических свойств металла «силовых» малоуглеродистых наплавов в зависимости от технологических параметров сварки // Вопросы материаловедения – 2017. № 4 (92). С. 140–148.

Синтез наночастиц Fe₂O₃

Р.Е. Шумилин¹, С.К. Дедушенко¹, Е.С. Трофимчук², В.Г. Костишин¹

E-mail: rus.shumilin.2002@mail.ru

¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Разработка новых методов получения стабильных наночастиц является актуальной задачей, поскольку даёт возможность получать материалы с уникальными свойствами. В основе одного из подходов получения наноматериалов лежит проведение синтеза требуемой фазы в наноразмерных объемах, например, мицеллах, эмульсиях, порах и т.д. [1]

В настоящей работе синтез наночастиц оксида железа(III) проводили в полимерных пленках, пористую структуру которых формировали по механизму крейзинга. Это явление представляет собой процесс перехода стеклообразных аморфных и частично кристаллических полимеров в высокодисперсное ориентированное состояние при их одноосном деформировании в адсорбционно-активных средах. В результате этого формируется система взаимопроникающих пор размером 10-30 нм, в объеме которых можно проводить синтез неорганических веществ, используя различные химические реакции [2]. Целью данной работы является исследование особенностей синтеза наночастиц Fe₂O₃ в пористой матрице полиэтилена и свойств полученных наноматериалов.

Пористую структуру в пленке полиэтилена высокой плотности формировали путем ее растяжения в среде н-гептана до степеней деформации 200 и 400 %. На первой стадии, используя метод противоточной диффузии, проводили синтез гидроксида железа по реакции между водными растворами хлорида железа(III) (0,5 М) и аммиака (4,2 М) непосредственно в объеме пор полимера. В результате были получены нанокомпозиты с однородным распределением частиц наполнителя диаметром 30-50 нм. На второй стадии полученные композиты нагревали до 600°C в атмосфере воздуха. После выгорания полиэтилена остаток представлял собой хрупкую пористую пластину α-Fe₂O₃ темно-коричневого цвета, состоящую из частично спекшихся наночастиц размером 10-60 нм и размером пор 30-80 нм.

Изучение полученных наноматериалов методом мёссбауэровской спектроскопии показало, что в зависимости от размера частиц α-Fe₂O₃ вид спектров изменялся от искаженного секстета (наиболее крупные частицы) до дублета с признаками магнитной структуры (наиболее мелкие частицы). При этом запись спектров для этих образцов в магнитном поле или при температуре жидкого азота приводила к улучшению разрешения секстетов и более узким линиям.

Уменьшение размера частиц α-Fe₂O₃ также привело к изменению их магнитных свойств. Было обнаружено, что полученные нанопористые материалы проявляют нехарактерные магнитные свойства – они притягиваются к магниту. При этом порошок α-Fe₂O₃, полученный при объемном осаждении, таких магнитных свойств не проявляет.

1. N. Baig, I. Kaymakams, W. Falath Nanomaterials: a review of synthesis methods, properties, recent progress, and challenges // Mater. Adv. 2021 V. 2. №6. P. 1821-1871.
2. Трофимчук Е.С., Никонорова Н.И., Нестерова Е.А., Мальцев Д.К., Якухнов С.А., Иноземцева М.Н., Волинский А.Л., Бакеев Н.Ф. Получение нанопористых неорганических пластин // Российские нанотехнологии. 2012. Т. 7. №7-8. С. 41-46.

Расчет энергии парного взаимодействия пересекающихся дисклинаций и дилатационных нитей для моделирования релаксации механических напряжений***К.Р. Разживина¹, С.А. Красницкий¹, А.М. Смирнов¹***

E-mail: andrei.smirnov@niuitmo.ru

¹Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Наноструктуры с пентагональной симметрией находят широкое применение в современных устройствах электроники, фотоники и плазмоники [1]. Функциональные свойства таких структур во многом определяются особенностями строения, а именно – пятикратным циклическим двойникованием, вызывающим в них неоднородные остаточные напряжения и деформации [2]. При определенных условиях эти напряжения могут релаксировать за счет образования различных дефектных конфигураций [3]. В частности, можно ожидать сегрегацию примесных атомов вдоль осей пятикратного циклического двойникования [4]. Критические условия процесса релаксации могут быть определены в рамках континуальной теории дефектов, согласно которой упругие поля напряжений, обусловленные атмосферами примесных атомов и пятикратными двойниками, описываются дефектами дилатационного и дисклинационного типа [5]. Таким образом, настоящая работа посвящена расчету энергий парного взаимодействия прямолинейных дефектов дилатационного и дисклинационного типа.

В работе рассматривается упругая среда, содержащая пересекающиеся дефекты: дилатационные нити и клиновые дисклинации. Получена аналитическая формула, описывающая погонную энергию парного взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей в зависимости от угла между дефектами. Энергия взаимодействия принимает наибольшее значение, когда угол между нитями равен 0 или π , причем в этом случае погонная энергия взаимодействия равна удвоенной упругой энергии одной дилатационной нити. Если дилатационные нити пересекаются под прямым углом, то погонная энергия взаимодействия принимает нулевое значение. В этом вырожденном случае энергия взаимодействия нитей определяется общей собственной деформацией в точке пересечения нитей, а остальные участки не дают вклада в полную энергию взаимодействия.

Аналогичным образом изучены зависимости погонной энергии парного взаимодействия двух пересекающихся клиновых дисклинаций от величины угла между ними и коэффициента Пуассона среды. Если оси дисклинаций пересекаются под прямым углом, энергия взаимодействия принимает наименьшее значение. Если оси дисклинаций параллельны, значение энергии возрастает. Кроме того, показано, что, чем больше значение коэффициента Пуассона, тем выше значения энергии парного взаимодействия.

Полученные в работе аналитические соотношения представляют практическую ценность для дальнейшего исследования релаксационных процессов, связанных с сегрегацией примесей в икосаэдрических частицах, содержащих шесть пересекающихся клиновых дисклинаций мощностью 0,128 рад.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-72-10014

1. Zhou S., Zhao M., Yang T.-H., Xia Y. // *Materials Today*. 2019. Vol. 22, P. 108-131.2.
2. Marks L. D., Peng L. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2016. Vol. 28, No. 5, P. 053001.
3. Smirnov A. M., Krasnitskii S. A., Rochas S. S., Gutkin M. Yu. // *Reviews on Advanced Materials and Technologies*. 2020 Vol. 2, No. 3, P. 19-43.
4. Deng L., Liu X., Zhang X., Wang L., Li W., Sing M., Tang J., Deng H., Xiao S. Hu W. // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2019. Vol. 21, No. 9, P. 4802-4809.
5. Romanov A. E., Kolesnikova A. L. // *Progress in materials science*. 2009. Vol. 54, No. 6, P. 740-769.

Особенности ориентирования нематических жидких кристаллов на поверхности оксидов индия и олова с лазерно-осажденными углеродными нанотрубками***А.С. Тойкка^{1,2,3}, Н.В. Каманина^{1,2,3}***

E-mail: astoikka.nano@gmail.com

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*²*Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова, Санкт-Петербург, Россия*³*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

Нематические жидкие кристаллы (НЖК) - это оптически анизотропный, текучий и вязкий материал, свойства которого могут перестраиваться под действием внешних воздействий: электрических, магнитных, оптических, тепловых и акустических. Одной из основных задач при разработке устройств на основе НЖК является формирование необходимого распределения их молекул в объеме и приповерхностных слоях, что влияет на электрооптические свойства ЖК-континуума и, следовательно, на фазово-динамические характеристики устройств. Согласно потенциалу Рапини-Папулара [1], угол преднаклона НЖК зависит от поверхностной энергии сцепления, которая определяется через соотношение поверхностного натяжения жидкости и свободной поверхностной энергии (СПЭ) твердого тела. С целью управления данными параметрами, в конструкциях электрооптических устройств между слоем ЖК и прозрачными контактами располагаются ориентирующие слои. Однако, вместе с тем появляются дополнительные оптические и электрические потери, а конструкции ячеек становятся более сложными.

В данной работе предлагается использовать прозрачные контакты на основе тонких пленок оксидов индия и олова (ИТО) в качестве не только проводящих, но и ориентирующих слоев. Для этого на поверхность ИТО осаждались одностенные углеродные нанотрубки (SWCNTs) при варьируемой напряженности электрического поля в диапазоне 100-600 В/см. Для формирования ИТО пленок и их последующей модификацией SWCNTs использовался метод лазерно-ориентированного осаждения (LOD) [2] при применении CO₂-лазера с $\lambda=10,6$ мкм и мощностью 30 Вт. Источником ИТО служил порошок с 10% содержанием оксида олова и размером частиц 3-12 мкм (Ceram Inc.). Диаметр SWCNTs составлял 0,7-1,1 нм (Aldrich Co., No. 704121).

При анализе модифицированной поверхности ИТО измерялся гистерезис и временные зависимости смачивания. При последующим ОВРК-расчете [3], было обнаружено, что при осаждении УНТ на поверхность ИТО увеличивается дисперсионная компонента СПЭ с 22,2 мДж/м² до 25,0-31,4 мДж/м². При этом наблюдается компенсация полярной составляющей с 8,2 мДж/м² до 0,8-1,8 мДж/м². Вместе с тем, на основе атомно-силовой микроскопии в контактном режиме, при осаждении SWCNTs был обнаружен рост среднеквадратической шероховатости с 4,4 нм до 7,6-25,4 нм. Это позволило обеспечить увеличение контактного угла смачивания капель НЖК вида 5СВ с 36,6-40,1° до 52,7-59,0°, что свидетельствует и доказывает возможность использования поверхностей прозрачных контактов ИТО/SWCNTs в качестве перестраиваемых ориентирующих слоев в НЖК устройствах. Данная модификация существенно упростит технологический процесс конструирования ЖК-устройств и позволит использовать меньшие значения управляющего напряжения питания.

1. М.Г. Томилин, Г.Е. Невская. Фотоника жидких кристаллов // СПб.: изд. Политех. ун.-та. 2011, 741 с.
2. Патент РФ № 2405177, 2007. Оптическое покрытие на основе ориентированных в электрическом поле углеродных нанотрубок для оптического приборостроения, микро- и нанoeлектроники при нивелировании границы раздела сред: твердая подложка-покрытие. Каманина Н.В., Васильев П.Я., Студенов В.И.
3. Б.Д. Сумм. Гистерезис смачивания // Соросовский образовательный журнал. № 7. С. 98-102. 1999.

Влияние модификаторов на основе полиэтиленгликоля на термоЭДС бумаги из одностенных углеродных нанотрубок

С.А. Тургенева¹, Д.В. Юдаев², С.Н. Смирнов², В.О. Сайк²

E-mail: s.turgeneva@g.nsu.ru

¹Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, физический факультет, Новосибирск, Россия

²ООО «Научный центр по теплофизике и энергетике», Новосибирск, Россия

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) – это аллотропная модификация углерода, получаемая различными методами синтеза, в основном с помощью химического осаждения из газовой фазы. По структуре ОУНТ представляют из себя свернутые в разных направлениях листы графена. ОУНТ обладают высокой тепло- и электропроводностью, что вызывает как фундаментальный, так и прикладной интерес.

Материаловеды исследуют применимость ОУНТ и материалов с их добавлением во многих областях электроники. В частности, бумага на основе ОУНТ считается перспективным материалом для термоэлектрических устройств, которые преобразовывают тепловые потери в электрическую энергию [1] или являются компонентами носимой электроники, которые встраиваются в умный текстиль [2].

Бумага из немодифицированных нанотрубок ведет себя как полупроводник *p*-типа из-за допирования кислородом воздуха, однако для изготовления термоэлектрических устройств необходимы также полупроводники *n*-типа, в которых носителями заряда являются электроны. Такие модификаторы, как полиэтиленгликоль-4000 (ПЭГ-4000) или комплекс ПЭГ-4000 и соли щелочного металла, могут преобразовать материал на основе ОУНТ в полупроводник *n*-типа.

Задачей данного исследования являлось исследование эффективности такого допирования на проводимость и термоЭДС ОУНТ.

Эффективность переноса заряда, зависящая от используемых реагентов, в этой работе определялась с помощью измерения спектров поглощения дисперсий ОУНТ с исследуемыми модификаторами и количественно выражалась в смещении уровня Ферми ΔE_F .

Образцы для измерения проводимости и коэффициента Зеебека представляли собой полосы бумаги из модифицированных ОУНТ. Проводимость измерялась четырехконтактным методом, а коэффициент термоЭДС (коэффициент Зеебека) рассчитывался из измерения разницы напряжений и температур в образце, концы которого находились при разных температурах. Результаты измерений показали, что рост ΔE_F согласуется с ростом проводимости образцов бумаги, а также наблюдается постепенный выход коэффициента Зеебека на отрицательное постоянное значение. Это значит, что при достаточном сдвиге уровня Ферми бумага становится полупроводником *n*-типа. Значение фактора мощности для образцов с наибольшим сдвигом уровня Ферми ΔE_F составляет 282 мкВт/м/К², что сравнимо со значениями, получаемыми в современных публикациях. Проведены измерения для бумаги на основе трубок с различными диаметрами (1,4; 2 и 3 нм) при использовании одного ПЭГ-4000 в качестве модификатора. Рост диаметра приводит к увеличению абсолютного значения коэффициента Зеебека, однако проводимость значительно снижается, что негативно сказывается на значении фактора мощности.

Таким образом, предлагаемый метод модификации электронной структуры ОУНТ интересен для термоэлектрических применений, однако требует дальнейшего анализа и изменения условий эксперимента для получения более высоких значений фактора мощности.

1. Kim S., Mo J. H., Jang K. S. Solution-processed carbon nanotube buckypapers for foldable thermoelectric generators //ACS applied materials & interfaces. – 2019. – Т. 11. – №. 39. – С. 35675-35682.
2. Di J. et al. Carbon-nanotube fibers for wearable devices and smart textiles //Advanced materials. – 2016. – Т. 28. – №. 47. – С. 10529-10538.

Исследование влияния температуры отпуска на механические свойства и хладостойкость среднеуглеродистых среднелегированных высокопрочных сталей

Ю.В. Веретенникова¹

E-mail: npk3@crism.ru

¹ Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

Портовая инфраструктура северных регионов России требует серьезной модернизации. В связи с этим особое место занимает проведение дноуглубительных работ в морских и речных портах в районах Крайнего Севера [1]. Одним из вариантов конструкций дноуглубительных судов являются земснаряды с рабочими органами в виде ковшей или черпаков. Актуальной является задача создания хладостойких износостойких сталей с повышенным уровнем эксплуатационных характеристик в сочетании с доступной ценой [2]. Основным требованием к сталям для рабочих органов дноуглубительных судов является стойкость в работе при неблагоприятных разрушающих воздействиях обрабатываемой среды - песка, твердого минерального сырья и других агрессивных материалов, в том числе при низких климатических температурах.

Целью работы является исследование влияния температуры отпуска на механические свойства и хладостойкость среднеуглеродистых среднелегированных высокопрочных сталей.

Материалом для исследования послужила высокопрочная износостойкая сталь с пределом текучести 1500 МПа, разработанная в ЦНИИ КМ «Прометей». Химический состав стали с пределом текучести 1500 МПа представлен ниже.

Массовая доля элементов, % [3]

C	Si	Mn+Ni+Cu	Cr+Mo	Ti	V	Nb	Al	Ca	B	S	P
0,37	0,26	2,06	1,15	0,03	0,01	0,02	0,06	0,01	0,03	0,009	0,006

Проведены исследования влияния режимов термической обработки на изменение прочностных и вязкопластических свойств, а также хладостойкость и износостойкость высокопрочной среднелегированной стали. Установлено, что отпуск в интервале температур 560-580°C обеспечивает оптимальное сочетание уровня прочностных и вязкопластических свойств высокопрочных износостойких сталей, предназначенных для изготовления рабочих органов дноуглубительных судов. Высокий отпуск в отличие от низкого, обычно используемого для изготовления деталей из износостойкой стали, оказывает положительное влияние на хладостойкость стали, обеспечивая удовлетворительный уровень ударной вязкости при температуре испытания минус 40°C.

Установлено, что для стали данного комплекса легирования выбор оптимального режима термической обработки позволяет гарантировать достаточный запас прочности, пластичности и вязкости при работе в сложных климатических и эксплуатационных условиях.

1. Касаткин Р.Г. Роль Северного морского пути в Арктической транспортной системе // Региональная экономика: теория и практика. 2008. №23 (80). С. 50-55;
2. Чукин М.В., Салганик В.М. и др. Анализ технических требований, предъявляемых к наноструктурированному листовому прокату // Обработка сплошных и слоистых материалов. 2014. №2. С. 19-28.
3. Патент RU 2606825 С1, «Высокопрочная износостойкая сталь для сельскохозяйственных машин (варианты)».

Синтез малослойного графена в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза и его применения

А.А. Возняковский¹, А.П. Возняковский¹, С.В. Кидалов¹, Н.Д. Подложнюк¹, Е.И. Калашникова¹

E-mail: alexey_inform@mail.ru

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

² ФГБУ "НИИСК", Санкт-Петербург, Россия

Графеновые наноструктуры (ГНС) активно используются исследователями для создания более эффективной продукции в различных отраслях. Причиной этому служит их рекордные характеристики: теплопроводность однослойного графена составляет порядка 5000 Вт/(м*К), модуль Юнга достигает 1 ТПа, а удельная поверхность оценивается величиной порядка 2630 м²/г. Однако, из-за несовершенства методик синтеза ГНС, как по подходу “снизу-вверх”, так и по подходу “сверху-вниз”, на данный момент отсутствует способ синтеза больших объемов ГНС высокого качества и приемлемой для промышленности себестоимости.

Целью данной работы является разработка высокопроизводительной методики синтеза малослойного графена (МГ, количество слоев не более 5 [1]) высокого качества и применимой себестоимостью.

Нами была разработана методика синтеза МГ из биополимеров циклического строения (в т.ч. из отходов деревообрабатывающей промышленности таких как кора деревьев, лигнин) в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) [2]. Под методом СВС понимают процесс перемещения спиновой волны сильной экзотермической реакции по смеси реагентов (окислителя и восстановителя), в котором тепловыделение локализовано в слое и передается от слоя к слою путем теплопередачи по механизму разветвленно-цепного воспламенения. Разветвленно-цепное воспламенение, в отличие от теплового, вызвано лавинным размножением активных промежуточных продуктов - свободных атомов, радикалов и иногда также возбужденных частиц - в их быстрых реакциях с исходными реагентами и между собой. Такой механизм и обеспечивает возможность протекания реакции в узкой зоне, перемещающейся по веществу за счет теплопередачи после локального инициирования реакции в слое холодной смеси реагентов, не подвергающейся нагреву по объёму вещества.

Было установлено, что МГ, синтезированный по данной методике в отличие от ГНС, синтезированных по альтернативным методикам, не содержит в своей структуре дефекты Стоуна-Уэльса, что позволяет ему показывать высокую эффективность в различных отраслях таких как полимерные композиты, сорбенты, суперконденсаторы и т.д.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-79-10254

1. ISO/TR 19733:2019 Nanotechnologies — Matrix of properties and measurement techniques for graphene and related two-dimensional (2D) materials
2. Voznyakovskii A.P., Vozniakovskii A.A., Kidalov S.V. // *Nanomaterials*. 2022. Т. 12, №4. 657.
- 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 гидроксилированных производных эндометаллофуллеренов лантанидов. Патент РФ № 2659972, 2018.
3. Седов В.П. и др. Способ получения эндофуллеренов 3d-металлов. Патент РФ № 2664133 С1, 2018.

Разработка принципов создания металлокерамических композиционных материалов, армированных дисперсными частицами, для микроплазменного напыления функциональных покрытий

Н.А. Сердюк¹, Т.И. Бобкова¹

E-mail: serdiuknikita@mail.ru

¹ *Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» им. И. В. Горынина НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия*

Актуальным и эффективным решением проблемы очистки воды от различных видов загрязнений с предприятий, выбрасывающих в окружающую среду отходы органического происхождения, является использование наноразмерных фотокатализаторов. Из числа различных материалов, которые можно использовать в качестве фотокатализатора, диоксид титана ввиду химической и термической стабильности, нетоксичности, высокой фотокаталитической активности является наиболее применимым [1,2].

Традиционно применяемый подход в создании фотокаталитических систем заключается в формировании пористого слоя-носителя для катализатора и последующего нанесения наноструктурированного слоя диоксида титана на этот носитель, что существенно удорожает процесс и не позволяет достигать оперативного изготовления высокоэффективных проходных блоков фотокаталитической очистки жидких сред.

В данном исследовании представлен путь реализации идеи одностадийного получения фотокатализатора на металлической подложке за счет микроплазменного напыления вновь разработанного вида композиционного металломатричного порошка, легированного диоксидом титана и дигидридом титана, используемого в качестве «жертвенного» материала.

Целью является исследование закономерностей получения тонкодисперсной композиционной системы «Ti-TiO₂-TiH₂» и формирования из нее в условиях микроплазменного воздействия высокоразвитой проницаемой поверхности наноструктурированного диоксидом титана фотокаталитического слоя, а также разработка метода микроплазменного напыления этого слоя на проницаемые материалы, перспективных для применения в системах очистки воды.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

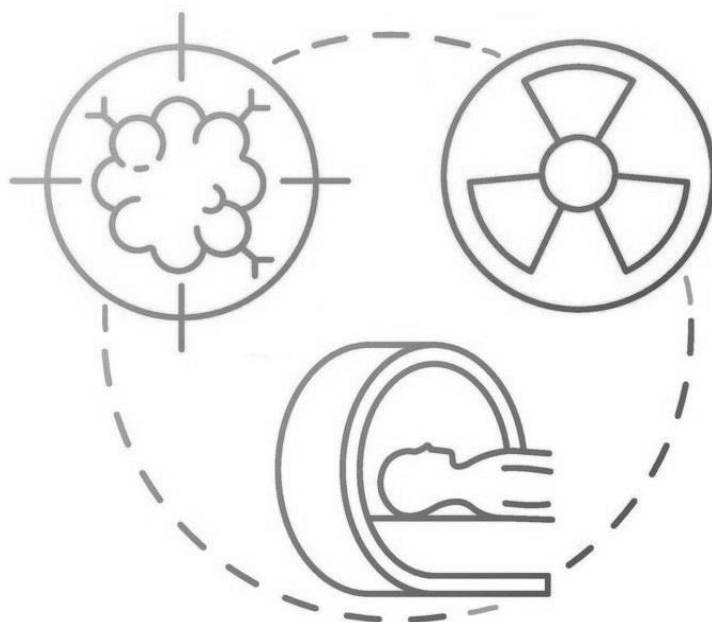
Исследован процесс синтеза композиционных наноструктурированных порошков системы «Ti-TiO₂-TiH₂» с заданными характеристиками и определено влияние параметров синтеза на свойства порошков.

Определено необходимое количество исходных веществ, способа и режимов получения из них тонкодисперсной композиционной системы «Ti-TiO₂-TiH₂», из которой при напылении могут быть сформированы покрытия, имеющие наноструктурированную и высокоразвитую фотокаталитическую поверхность. Изучен процесс микроплазменного напыления нового класса композитов с использованием «жертвенного» материала с установлением механизма развития удельной площади поверхности за счет разложения одного компонента.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, 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»

1. Wang Y., Huang Y., Ho W. et al. Biomolecule-controlled hydrothermal synthesis of C–N–S-tridoped TiO₂ nanocrystalline photocatalysts for NO removal under simulated solar light irradiation // Journal of Hazardous Materials. 2009. Vol. 169, no. 1. P. 77 – 87. 35.
2. Sviridova T.V., Sadovskaya L.Yu., Konstantinova E.A. et al. Photoaccumulating TiO₂-MoO₃, TiO₂-V₂O₅ and TiO₂-WO₃ heterostructures for self-sterilizing systems with the prolonged bactericidal activity// Cat. Lett. 2019. V. 149. P. 1147.

ЯДЕРНАЯ МЕДИЦИНА



Приборное оснащение экспериментальной установки Радиобиологический стенд (РБС) У-70

А.Г. Васильева, Д.А. Васильев, А.В. Кошелев, В.И. Ковальцов, А.В. Лутчев, С.В. Маконин, А.В. Максимов, Е.В. Парменова, В.А. Пикалов, М.К. Полковников

E-mail: vasilyeva-ag@ihep.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

В НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ освоен медленный вывод (до 900 мс) ускоренных ионов углерода промежуточных энергий (200–450 МэВ/нуклон) из ускорительного комплекса У-70 в экспериментальный зал, где создана экспериментальная установка Радиобиологический стенд (РБС) [1]. Установка регулярно работает в каждом сеансе работы ускорительного комплекса У-70 с 2015 года в качестве центра коллективного пользования. Пользователи РБС - радиобиологи, медицинские физики и медики, специалисты из МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России (Обнинск), ГНЦ РФ – ИМБП РАН (Москва), ИТЭБ РАН (Пушино), ФТЦ ФИАН (Протвино) и других институтов. Основными направлениями исследований на действующей установке являются радиобиологические эксперименты на выведенном пучке ускоренных ионов углерода и доклинические исследования, направленные на разработку новейших методик лечения онкологических заболеваний с применением ионно-лучевой терапии [2].

В докладе представлен обзор приборов и устройств, которые используются при сопровождении радиобиологических экспериментов на установке РБС, в том числе средств пассивной модификации пучка и оборудование диагностики пучка: плоскопараллельная ионизационная камера, мозаичная ионизационная камера, средства калибровки ионизационных камер, водяной фантом с 3D-системой перемещения, 6-ти координатный стол, дегрейдер, гребенчатые фильтры, лазерная система позиционирования, клинические дозиметры. Также описаны программы для работы с оборудованием РБС, кратко описан процесс архивирования полученных результатов.

Приведены измеренные характеристики пучка. Энергия пучка ионов углерода C⁶⁺, его интенсивность, временная структура и другие параметры на данный момент соответствуют необходимым требованиям для медицинского применения и радиобиологических исследований: равномерность облучения не хуже 95%, точность позиционирования не хуже 0,1 мм, точность отпуска дозы – не хуже $\pm 2,5\%$.

На установке Радиобиологический стенд проведено и продолжает проводиться большое количество доклинических и радиобиологических исследований. Ведутся работы по разработке методики использования ионов углерода в медицинских целях в строящемся первом в России экспериментально-клиническом центре ионной лучевой терапии (ЭКЦ ИЛТ) на базе действующего Ускорительного комплекса У-70 в НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ [3]. Постоянная модернизация установки РБС даёт возможность разрабатывать и отлаживать новое оборудование для управления и диагностики ускоренного пучка ионов углерода с целью улучшать качество и точность облучения.

1. Antipov Y.M. et al. Slow Extraction of a Carbon-Nuclei Beam from the U-70 Synchrotron // Instruments and Experimental Techniques. 2021. V. 64. No. 3. P. 343–351.
2. V. Pikalov et al., The Results Obtained on "Radiobiological Stand" Facility, Working with the Extracted Carbon Ion Beam of the U-70 Accelerator // Proceedings of the 27th Russian Particle Accelerator Conference, RuPAC2021. Alushta, Russia: JACoW Publishing, Geneva, Switzerland, October 2021, P. 124–126.
3. 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».

Практическое применение растворного реактора в ядерной медицине

Т.В. Бойкова¹, Ю.О. Кочнов¹, С.В. Мясников¹, Н.В. Петрунин¹

E-mail: Kochnov_YO@nrcki.ru

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

Исследовательский растворный реактор «Аргус» – установка, введена в эксплуатацию в 1981 году в НИЦ «Курчатовский институт». Реактор «Аргус» в комплексе с цепочкой защитных камер может обеспечить экологически чистое и экономически эффективное производство радионуклидов медицинского назначения, таких как: ⁹⁹Mo, ⁸⁹Sr, и др. [1, 2].

В докладе демонстрируются основные технические особенности и возможности реактора «Аргус» по наработке ⁹⁹Mo и ⁸⁹Sr.

В настоящее время на растворном реакторе «Аргус» реализованы на ВОУ-топливе экспериментальные петлевые устройства для получения данных изотопов.

Способ получения ⁸⁹Sr основывается на его выделении при распаде осколка газообразного ⁸⁹Kr, образующегося при работе реактора на мощности.

Основные этапы технологического процесса получения ⁸⁹Sr:

1. образование предшественников ⁸⁹Sr в результате деления ²³⁵U;
2. выход радионуклидов криптона из растворного топлива;
3. отбор газовой смеси;
4. фильтрация газового потока с целью очистки от ⁹⁰Sr;
5. осаждение и смыв ⁸⁹Sr.

Полный процесс получения ⁹⁹Mo на базе растворенного реактора осуществляется в следующей технологической последовательности:

- работа реактора на стационарном уровне мощности в течение заданного времени
- останов реактора и его выдержка в подкритическом состоянии
- прокачка топливного раствора по замкнутому контуру экспериментального петлевого устройства из реактора через сорбционную колонну обратно в реактор;
- извлечение сорбционной колонки из контура и перегрузка ее в транспортный упаковочный контейнер
- транспортировка контейнера в комплекс горячих камер;
- выделение ⁹⁹Mo.

1. Исследовательские ядерные установки России: [сборник статей] / под ред. Н. В. Архангельского [и др.]. — М.: ОАО «НИКИЭТ», 2012. — 326 с.
2. Ядерно-технологический комплекс для производства медицинских изотопов (⁹⁹Mo, ⁸⁹Sr) на основе инновационной растворной технологии / И. Т. Третьяков, Н. В. Романова, Н. С. Калашников [и др.] // Годовой отчет НИКИЭТ-2013 / ОАО "НИКИЭТ". – Москва: ОАО "НИКИЭТ", 2013. – С. 38-40.

Обоснование эффективности технологии наработки медицинских изотопов на растворном реакторе «Аргус»

Т.В. Бойкова¹, Ю.О. Кочнов¹, С.В. Мясников¹, Н.В. Петрунин¹

E-mail: Boykova_TV@nrcki.ru

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

В Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт» более сорока лет эксплуатируется растворный исследовательский реактор «Аргус». Реактор «Аргус» предоставляет принципиальную возможность наработки изотопа ⁹⁹Mo непосредственно из топливного раствора без изменения состава и характеристик активной зоны [1].

Для выделения ⁹⁹Mo топливный раствор, после работы реактора на мощности, прокачивается через специальный сорбент на основе оксида титана. При этом уран не сорбируется, и топливный раствор через экспериментальное петлевое устройство полностью возвращается в корпус реактора.

Эта новейшая технология производства ⁹⁹Mo позволяет снизить необходимую мощность реактора в 100 и более раз по сравнению с мощностью реактора в традиционной мишенной технологии.

С целью продвижения технологии получения медицинских изотопов как у нас в стране, так и за рубежом в 2014 году реактор «Аргус» был переведен на низкообогащенное топливо без изменения конструкции реактора. Концентрация урана в топливном растворе составляет 380 г/л.

Первые опыты при исследовании характеристик реактора с НОУ-топливом показали некоторые недостатки, делающие использование реактора «Аргус» в производстве изотопов, недостаточно эффективным [2]. К таким недостаткам относятся: небольшой запас реактивности, невысокая эффективность сорбции и десорбции ⁹⁹Mo. Анализ причин таких явлений указал пути их устранения. Для оптимизации параметров и конструктивных особенностей реактора и технологического процесса производства молибдена должны быть выполнены следующие научно-исследовательские работы:

- обоснование оптимальных параметров топлива ИР «Аргус»;
- обоснование параметров ИР «Аргус» в обеспечение оптимизации процесса производства ⁹⁹Mo;
- расчетно-экспериментальные исследования в обеспечение перевода реактора «Аргус» на оптимальное топливо;
- расчетно-экспериментальные исследования в обоснование технологического процесса производства радионуклидов медицинского назначения.

По результатам этой работы должен быть получен образец ⁹⁹Mo с подтвержденными характеристиками на соответствие эталонному ⁹⁹Mo, из которого изготавливается медицинский ^{99m}Tc.

1. Исследовательские ядерные установки России: [сборник статей] / под ред. Н. В. Архангельского [и др.]. — М.: ОАО «НИКИЭТ», 2012. — 326 с.
2. Кочнов Ю.О., Бойкова Т.В., Павлов А.К., Петрунин Н.В. Обеспечение ядерной и радиационной безопасности при перегрузочных работах на растворном реакторе // Сборник тезисов XXII научной школы молодых ученых, Москва, 23–24 мая 2023 года / под общ. ред. акад. РАН Л. А. Большова. — Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2023. — С. 36.

Молекулярно-клеточные эффекты в мезенхимальных стволовых клетках человека, облученных в малых дозах***А.К. Чигасова^{1,2,3}, М.В. Пустовалова³, Н.Ю. Воробьева^{1,3}, А.Н. Осипов^{1,3}***

E-mail: Annagrekhova1@gmail.com

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия²Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия³Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия

В последнее время стремительно развивается регенеративная медицина, в которой часто применяется клеточная терапия с использованием стволовых клеток человека, в частности мультипотентных мезенхимальных стволовых клеток (МСК). Несмотря на положительные стороны использования МСК, существует ряд малоизученных аспектов, требующих проведения серьезных фундаментальных исследований. Одними из наиболее важных являются возможные негативные эффекты воздействия ионизирующего излучения в малых дозах при проведении часто сопутствующих клеточной терапии диагностических радиологических процедур, в частности, компьютерной томографии (КТ) [1]. Существует много эпидемиологических работ, свидетельствующих об увеличении рисков возникновения злокачественных новообразований у детей и подростков после проведения КТ. Зарегистрированы случаи отказа пациентов от проведения рентгенологических исследований из-за радиophobia. С другой стороны, появились данные, напротив, свидетельствующие о положительных эффектах КТ: уменьшение смертности от рака у людей и экспериментальных животных. Парадоксально, но особенности формирования ранних и отдалённых эффектов облучения в малых дозах в МСК мало изучены [1].

Среди различных повреждений ДНК, вызываемых ионизирующим излучением, двунитевые разрывы (ДР) являются наиболее опасными [2]. Именно ДР ДНК запускают реакции, затрагивающие почти каждый аспект клеточного метаболизма, и объединяющиеся термином «отклик на повреждение ДНК» (от англ. DNA damage response (DDR)) [3]. В докладе представлены результаты исследований количественных изменений фокусов ключевых белков клеточного отклика на повреждение ДНК (γ H2AX, 53BP1, RAD51 и ATM) в культивируемых МСК человека, подвергнутых воздействию тормозного фотонного излучения в малых (10-100 мГр) и средних (160-2000 мГр) дозах. Результаты исследований показали, что феномен длительного поддержания повышенного количества фокусов белка-маркера ДР гистона γ H2AX после облучения в малых дозах обусловлен образованием фокусов γ H2AX *de novo* в результате стимуляции клеточной пролиферации, а не малоэффективной, как считалось ранее, репарацией ДР ДНК. На основании исследования изменений количества фокусов γ H2AX и белка гомологической рекомбинации RAD51 продемонстрировано, что после облучения в малых дозах ДР элиминируются более корректно, чем после облучения в больших дозах. В целом полученные результаты свидетельствуют о том, что облучение МСК человека тормозным фотонным излучением в малых дозах не приводит к негативным эффектам, связанных с накоплением нерепарируемых ДР ДНК.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 23-14-00078

1. Пустовалова М.В., Грехова А.К., Осипов А.Н. Мезенхимальные стволовые клетки: эффекты воздействия ионизирующего излучения в малых дозах. // Радиационная биология. Радиоэкология. 2018. Т. 58. № 4. С. 352–362.
2. Bushmanov A., Vorobyeva N., Molodtsova D., Osipov A.N. Utilization of DNA double-strand breaks for biodosimetry of ionizing radiation exposure. // Environmental Advances. 2022. V. 8. ID: 100207.
3. Osipov A., Chigasova A., Yashkina E. et al. Residual Foci of DNA Damage Response Proteins in Relation to Cellular Senescence and Autophagy in X-Ray Irradiated Fibroblasts. // Cells. 2023. V. 12. № 8. ID:1209.

Графический интерфейс для системы планирования ионной лучевой терапии на основе 3D Slicer

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

E-mail: Ekaterina.Parmenova@ihep.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино

Эффективность использования пучков ускоренных ионов углерода при лечении определённых новообразований подтверждена клиническими испытаниями в области лучевой терапии. Для каждой установки, реализующей подобное облучение, необходима уникальная планирующая система. Она должна обеспечивать возможность работы с медицинскими DICOM-файлами и извлечение из этих файлов необходимой информации (числа Хаунсфилда, ROI и т.д.), а также работу с планарными и 3D изображениями для выбора правильной ориентации пациента. Специальные модули требуются для подготовки данных для алгоритмов Монте-Карло, запуска этих алгоритмов и обработки результатов их работы. Пользователь должен иметь возможность визуально оценивать форму болюса и конфигурацию коллиматора, а также получать гистограммы доза-объём для оценки корректности получаемых результатов [1].

В качестве графического интерфейса для системы планирования проектируемого центра ионной лучевой терапии на базе действующего Ускорительного комплекса У-70 НИИЦ «Курчатовский институт» - ИФВЭ в г. Протвино [2] выбран 3D Slicer. Это бесплатное программное обеспечение с открытым исходным кодом, которое находится в свободном доступе и предназначено специально для анализа и обработки медицинских изображений [3]. Значительным преимуществом использования 3D Slicer является возможность добавления к нему новых модулей, отвечающих конкретным практическим задачам.

В докладе представлен обзор возможностей 3D Slicer в контексте основы планирующей системы для лучевой терапии, описание необходимых дополнительных модулей и результаты начального этапа реализации данной работы.

1. Tsujii H. et al. Carbon Ion Radiotherapy. Principles, Practices and Treatment Planning // Springer Science & Business Media. – 2013. – 312 p.
2. Центр ионной лучевой терапии [Электронный ресурс] // Официальный сайт института физики высоких энергий имени А.А. Логунова. Режим доступа: http://www.ihep.su/files/Journal_2017_Final_2_05_02_2018.pdf
3. Fedorov A. et al. 3D Slicer as an image computing platform for the Quantitative Imaging Network // Magn Reson Imaging. 2012. V. 30. No. 9. P. 1323-41.

Модернизация системы планирования терапии быстрыми нейтронами циклотрона У-120

Е.А. Селихова¹, А.В. Вертинский¹, А.В. Конев¹, Е.С. Сухих^{1,2}, В.А. Лисин, К.С. Бразовский¹

E-mail: eas76@tpu.ru

¹Национальный Исследовательский Томский Политехнический университет, Томск, Россия

²НИИ онкологии Томского национального исследовательского медицинского центра, Томск, Россия

С постоянным развитием медицинских технологий, лучевая терапия продолжает занимать ключевое место в лечении онкологических заболеваний, демонстрируя высокую эффективность.

Несмотря на многие преимущества лучевой терапии, её результативность тесно связана с одним из важнейших этапов в процессе проведения лучевой терапии злокачественных новообразований для каждого пациента – дозиметрическим планированием облучения (уровнем точности расчета распределения поглощенной дозы в среде) и соответствующим использованием медицинского оборудования.

Циклотрон У-120, успешно функционирующий на базе НИ ТПУ на протяжении более четырёх десятилетий, предоставляет возможность для лучевой терапии с использованием быстрых нейтронов. Дозиметрическое планирование, основанное на расчете распределения дозы нейтронов, относительной биологической эффективности (ОБЭ) и модифицированной эмпирической формулы Эллиса – Фильда, называемая моделью время – доза – фракционирование (ВДФ) [1,2], в этом контексте способствует оптимизации лечения, уменьшая нагрузку на критические органы и ткани, тем самым, улучшая качество жизни пациентов.

Модернизация данной дозиметрической системы планирования, которая включает удобный интерфейс, возможность визуализации данных в 3D-формате, усовершенствование возможности подведения пучка, добавление новых функций для планирования дозовых нагрузок и оценки дозиметрического плана, позволит медицинским физикам и радиотерапевтам повысить эффективности лечения онкологических заболеваний.

В представляемом докладе освещаются ключевые моменты и преимущества дозиметрического планирования курсов нейтронной терапии на циклотроне У-120, роль модернизации программного обеспечения для планирования терапии быстрыми нейтронами, а также опыт его применения в клинической практике.

Работа выполнена при поддержке программы Минобрнауки «Приоритет 2030»

1. Лисин В.А. Линейно-квадратичная модель в планировании нейтронной терапии на циклотроне У-120 // Медицинская радиология и радиационная безопасность. 2018. Т. 63, № 5. С. 41-47.
2. Седов В.П., Лисин В.А. Модель ВДФ для дистанционной терапии злокачественных опухолей быстрыми нейтронами // Мед. радиология. 1988. Т. 33, № 9. С. 9-12.

Сапфировые дозиметрические сенсоры для ионной лучевой терапии

К.В. Сухарев¹, А.П. Воробьев¹, С.Н. Головня¹, О.П. Толбанов², А.В. Тяжев², А.Е. Венник², М.С. Скакунов², А.Н. Зарубин²

Email: Kirill.Sukharev@ihep.ru

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение «Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Протвино, Россия

²Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Целесообразность исследования возможности использования детекторов из монокристаллического искусственного сапфира в дистанционной лучевой терапии следует из сравнения параметров медицинских пучков протонов и ионов углерода, используемых в адронной терапии онкологических заболеваний, с имеющимися мировыми исследованиями транспорта носителей заряда в искусственных сапфирах и характеристик сенсоров при облучении бета-частицами и тяжелыми ионами [1,2].

В настоящей работе представлены результаты первых испытаний сапфировых сенсоров на пучке ионов углерода с энергией 175 и 380 МэВ/нуклон. Измерены зависимости сигналов сенсоров от приложенного высокого напряжения от 50 до 500В, зависимости сигналов от интенсивности пучка ионов углерода. Используя радиохромную плёнку ЕВТ-3, установленную перед сапфировыми сенсорами, измерено соотношение между поглощённой дозой в плёнке и суммарным зарядом, зарегистрированным сенсорами. Измерена зависимость величины сигналов сенсоров при напряжении на них 500В при постоянной интенсивности пучка после облучения дозой, регистрируемой относительным дозиметром. Впервые для сапфировых сенсоров измерена зависимость дифференциальной поглощённой дозы в водном фантоме (кривая Брэгга). Сигналы с детекторов измерялись при напряжении на детекторах 500В и времени интегрирования 900мс в интервале интенсивностей $7,0 \cdot 10^7 \div 4,5 \cdot 10^8$ ионов/импульс.

1. F. Wang et al. Electronic Charge Transport in Sapphire Studied by Optical-Pump/THz-Probe Spectrometer. // SPIE Proceedings, 2004. – 6 p.
2. А.В. Ефимов. Наноразмерные эффекты на поверхности монокристаллов Al_2O_3 и MgO , вызванные тяжёлыми ионами высоких энергий. // Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, Дубна – 2004. – 107 с.