



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

ВСЕРОССИЙСКОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

SCIENCE AND PRACTICE 2023

Первая Всероссийская студенческая конференция с международным участием, которая проводится в рамках празднования 80-летия национального исследовательского центра «Курчатовский институт» и 120-летия со дня рождения академиков И.В. Курчатова и А.П. Александрова



Очно и онлайн на двух площадках:

- **Физический факультет СПбГУ**
(г. Петергоф)
- **НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ**
(г. Гатчина)



22 ноября — 24 ноября 2023

Санкт-Петербург
2023 г.

ПОЛИТИКА РЕДАКЦИИ

1. *Материалы Всероссийской студенческой конференции «Наука и практика» находятся в открытом бесплатном доступе в сети Интернет. Это подразумевает возможность читать, скачивать, копировать, распространять, печатать, получать полные тексты статей данного издания по соответствующим ссылкам без предварительного разрешения автора или издателя.*
2. *Просим авторов обратить внимание на то, что их материалы, присланные в сборник материалов Конференции, будут размещены в открытом доступе в сети Интернет.*
3. *Редакция принимает к публикации только оригинальные тексты, не издававшиеся ранее. В случае включения в текст статьи фрагментов других работ следует делать ссылки на соответствующие источники. Статьи, в которых в процессе рецензирования выявляется некорректное цитирование (плагиат), к публикации не допускаются.*
4. *Авторы имеют право размещать свои статьи, опубликованные в сборниках материалов Всероссийской студенческой конференции «Наука и практика», на личных сайтах и в различных базах данных.*
5. *В случае возникновения претензий для урегулирования спорных вопросов между редакцией, авторами и третьими лицами рекомендуется направлять обращение к ответственному редактору по электронному адресу редакции sp23@spbi.ru.*

Устные доклады
Секция 1. Теоретическая физика.

ПОИСК ФИЗИКИ ЗА ПРЕДЕЛАМИ СТАНДАРТНОЙ МОДЕЛИ С ПОМОЩЬЮ G-ФАКТОРА СВЯЗАННОГО ЭЛЕКТРОНА

Авдеенко Е. Д.,
магистрант 1 года обучения
физического факультета НИУ ИТМО

Научный руководитель:
Волотка А. В., д.ф.-м.н,
ведущий научный сотрудник,
физический факультет, НИУ ИТМО

НИУ ИТМО
e.avdeyenko@metalab.ifmo.ru

Стандартная модель физики элементарных частиц – одна из самых успешных научных теорий, но, тем не менее, на данный момент, она не может являться полным описанием природы, так как не дает жизнеспособного кандидата на темную материю и не объясняет наблюдаемую барионную асимметрию Вселенной [1]. Поиск физики за пределами Стандартной модели — важнейшая научная задача, решение которой сможет приблизить современную физику к единой теории устройства Вселенной. Существует множество кандидатов на роль потенциального пятого взаимодействия и способ его детектирования [2]. Эксперименты по определению g -фактора свободного электрона уже использовались в качестве тестов для квантовой электродинамики (КЭД) и Стандартной модели. Благодаря росту точности в экспериментальном и теоретическом определении g -фактора связанных электронов подобные эксперименты имеют большое будущее в области поиска новой физики. Изучение влияния вклада новой физики в величину g - фактора электрона и сравнение этого вклада с существующими КЭД-поправками поможет найти эффективный способ тестирования физики за пределами Стандартной модели и определения ее констант.

В качестве модели потенциального пятого взаимодействия использовался потенциал портал Хиггса типа Юкавы [1, 2]. Массивные скалярные бозоны такого типа описывают взаимодействие между нуклонами и электронами, связываясь с обоими типами частиц спин-независимым образом. Были рассчитаны $1s$ и $2s$ поправки новой физики к g -фактору гелия, кальция, олова и свинца. Далее изучалось влияние модели ядра на чувствительность тестирования новой физики. В данной работе возможный вклад новой физики определялся неопределенностью в экспериментальном определении величины изотопического сдвига g -фактора (разности g -факторов двух изотопов), которая определялась теоретической неопределенностью, а та, в свою очередь определялась неопределенностью из вклада поправки на конечный размер ядра, являющейся поправкой с наибольшей погрешностью. С помощью данных о неопределенностях в определении радиусов ядер [3] и методов [4,5] были рассчитаны поправки в изотопический сдвиг на конечный размер ядра для двух моделей ядра: сферической и Ферми для тех же элементов. Затем рассчитаны вносимые ими погрешности. Далее те же расчеты были проделаны для метода специальных разностей — с целью устранить вносимые поправкой неопределенности и увеличить эффективность определения новой физики. Затем, исходя из этих данных, были построены зависимости константы новой физики от массы ее бозона для различных элементов. В результате удалось установить, что тестирование новой физики более эффективно для метода специальных разностей и меньших зарядовых чисел элементов.

Проведен расчет и анализ влияния модели ядра на погрешность определения вклада новой физики в величину g -фактора связанного электрона различных элементов, а также подробный анализ метода изотопического сдвига, рассмотрены вклады различных КЭД-эффектов, построены графики зависимости величины вклада новой физики в g -фактор от массы бозона гипотетического пятого взаимодействия.

Литература:

1. Debierre, Vincent & Keitel, C.H. & Harman, Zoltán. Fifth-force search with the bound-electron g factor // Physics Letters B.2020. V 807. P. 135–147.

2. Arcadi, G., Djouadi, A., & Raidal, M Dark Matter through the Higgs portal // Physics Reports. 2019. V 842. P. 1. 180.
3. Angeli & K.P. Marinova. Correlations of nuclear charge radii with other nuclear observables // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 2015. V42. N 5. P. 55–108.
4. Kozhedub, Y. S. and Andreev, O. V. and Shabaev Nuclear deformation effect on the binding energies in heavy ions// Physics Letters A. 2008. V77. N3.P. 501–512.
5. D.A. Glazov, V.M. Shabaev Finite nuclear size correction to the bound-electron g factor in a hydrogenlike atom // Physics Letters A. 2002.V 297. P. 408–411.

RELATIVISTIC CALCULATIONS OF THE GROUND STATE OF CO MOLECULE

N.K. Dulaev^{1,2}, I.I. Tupitsyn¹, V.M. Shabaev^{1,2}¹Санкт-Петербургский государственный университет²НИЦ «Курчатовский Институт» — ПИЯФ*Санкт-Петербургский государственный университет**Keywords: carbon monoxide, quantum electrodynamics, relativistic effects*

The study of the carbon monoxide molecule is an important subject in modern physics and astrophysics. The investigation of the spectroscopic characteristics of CO allows to study the isotopic composition of the Sun, the history and formation of the Solar System, galactic structures and stars. The spectrum of the CO molecule has been detected in the atmosphere of Mars and Venus. In addition, CO has a significant impact on the earth's atmosphere: carbon monoxide acts as pollution gas and negatively affects human health.

One of the important spectroscopic characteristics of the CO molecule is the potential energy curve – the dependence of the potential energy of the molecule on the internuclear distance. Over the past decades, numerous theoretical works have been carried out to study the behavior of the potential energy curve in various intervals of internuclear distances. Semi-empirical [1,2] and non-empirical *ab initio* calculations [3] were carried out. However, non-empirical calculation of the potential energy curve not only in the region of the potential minimum, but also in the region of large internuclear distances carried out with one theoretical method are in demand. In addition, to improve the accuracy of the results of theoretical calculations, it is necessary to take into account quantum electrodynamic (QED) corrections.

In the present work, the theoretical calculations of the potential energy curve of the ground state of CO molecule in the region of internuclear distances 0.5 – 30.0 a.u. are carried out using the multi-reference configuration interaction method in the basis of the Dirac-Fock-Sturm orbitals. In addition, the QED corrections to the energy of the molecule are calculated employing the model-QED-operator approach.

The work was supported by the Russian Science Foundation, Grant № 22-62-00004.

1. Meshkov, V. et al. Semi-empirical ground-state potential of carbon monoxide with physical behavior in the limits of small and large inter-atomic separations // *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*. 2018. V. 217. P. 262.
2. Hajigeorgiou, P. The extended Hulbert–Hirschfelder-long-range oscillator model for direct-potential-fit analysis // *International Journal of Quantum Chemistry*. 2018. V. 118. № 4.
3. Konovalova, E.A. et al. The Effect of Relativistic Interactions on the Spectral Characteristics of the Ground State of Carbon Monoxide // *Optics and spectroscopy*. 2018. V. 125, P. 470.

G ФАКТОР МНОГОЗАРЯДНЫХ ЛИТИЕПОДОБНЫХ ИОНОВ: МЕЖЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Мошкин А. Д.,
бакалавр 4 года обучения
физического факультета

Научный руководитель:
Глазов Д. А., к.ф.-м.н.,
ведущий научный сотрудник,
физический факультет,
университет ИТМО

Санкт-Петербургский государственный университет
st086491@student.spbu.ru

Ключевые слова: g-фактор, литиеподобные ионы, нерелятивистский предел.

Высокоточные измерения g-фактора многозарядных ионов, за последние два десятилетия, обеспечили беспрецедентную проверку квантовой электродинамики в связанных состояниях [1]. На данный момент экспериментальная точность для H-подобных, Li-подобных и В-подобных ионов достигла значений порядка 10^{-9} — 10^{-11} [2]. Благодаря этим исследованиям было получено наиболее точное значение массы электрона [3]. Кроме того, измерение g-фактора лёгких и тяжёлых многозарядных ионов открывает перед нами возможность независимого определения параметров ядра, постоянной тонкой структуры и поиска новой физики [4]. Вместе с этим было установлено явное несоответствие между теоретическими и экспериментальными данными [5], что побуждает к дальнейшим исследованиям.

В данной работе исследуются корреляционные эффекты при малых значениях заряда ядра для кулоновского потенциала. Поправки на межэлектронное взаимодействие рассматриваются в рамках теории возмущений в приближении Брейта. Для этих поправок различными способами вычисляются коэффициенты разложения по степеням αZ . Были выполнены расчёты для Li-подобных 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 гранта РНФ 22-12-00258

Литература:

1. 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.
2. Glazov D.A. *et al.* g Factor of Lithiumlike Silicon: New Challenge to Bound-State QED // Phys. Rev. Lett. 2019, 123, 173001.
3. Sturm S. *et al.* High-precision measurement of the atomic mass of the electron // Nature 2014, 506, 467.
4. Shabaev V.M. *et al.* g-Factor of Heavy Ions: A New Access to the Fine Structure Constant // Phys. Rev. Lett. 2006, 96, 253002.
5. Yerokhin V.A. *et al.* Two-photon-exchange corrections to the g factor of Li-like ions // Phys. Rev. A 2021, 104, 022814.

ИЗЛУЧЕНИЕ ЗАКРУЧЕННЫХ ФОТОНОВ ЭЛЕКТРОНОМ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

И.И. Павлов, Д.В.Карловец

НИУ ИТМО
ilya.pavlov@metalab.ifmo.ru

Ключевые слова: закрученные частицы, синхротронное излучение, квантовая электродинамика

Теория излучения релятивистских частиц активно развивалась в середине 20-го века, что имело большое значение для разработки и практического применения мощных источников электромагнитных волн - синхротронов [1]. Кроме того, она играет ключевую роль в описании таких астрофизических объектов, как нейтронные звезды [2]. Важнейший квантовый эффект, обычно не рассматриваемый в контексте этой задачи, состоит в том, что излученный фотон квантово запутан с электроном. Из-за этого состояние излученного фотона может оказаться разным в зависимости от способа детектирования конечного состояния системы [3]. В отличие от традиционного подхода, где одновременно фотон и электрон считаются обнаруженными в определенном состоянии, в настоящей работе мы предполагаем, что детектируется только электрон. Такой подход позволяет не только изучать вероятности переходов между конкретными состояниями электрона, но и явно получать состояния излученных фотонов «самих по себе», т. е. независимо от детектора. Поскольку состояния электрона в однородном магнитном поле (релятивистские уровни Ландау) обладают определенными значениями полного углового момента, можно предположить, что при переходе между состояниями угловой момент должен передаваться излученному фотону, что уже было проверено в рамках классической теории [4] и в рамках КЭД для скалярной заряженной частицы [5].

В настоящей работе в формализме КЭД в картине Фарри получен векторный потенциал фотона, излучаемого электроном в магнитном поле. Показано, что излученный фотон является пучком Бесселя, распространяющимся вдоль магнитного поля. Явно продемонстрировано, что состояние фотона является собственным для оператора проекции полного углового момента на направление магнитного поля, то есть часть углового момента электрона действительно передается фотону. Также проведен анализ вероятности и интенсивности излучения фотонов с определенными значениями углового момента для различных параметров начального и конечного электрона. Обнаружено, что в сильном магнитном поле преобладает излучение фотонов с угловым моментом порядка единицы, в то время как излучение «незакрученных» фотонов сильно подавлено. При этом оказывается, что интенсивность излучения закрученных фотонов с конкретным угловым моментом почти не зависит от импульса начального электрона.

Литература:

1. Sokolov A., Ternov I. M. Relativistic electron //Moscow Izdatel Nauka. – 1974.
2. Bordovitsyn V. A. et al. Synchrotron radiation theory and its development: in memory of IM Ternov. – World Scientific, 1999. – Т. 5.
3. Karlovets D. V. et al. Generation of vortex particles via generalized measurements //The European Physical Journal C. – 2022. – Т. 82. – №. 11. – С. 1008.
4. Katoh M. et al. Angular momentum of twisted radiation from an electron in spiral motion //Physical Review Letters. – 2017. – Т. 118. – №. 9. – С. 094801.
5. Karlovets D., Di Piazza A. Emission of twisted photons by a scalar charged particle in a strong magnetic field //Physical Review D. – 2023. – Т. 108. – №. 6. – С. 063007.

**MANY-POTENTIAL CONTRIBUTIONS TO THE SELF-ENERGY DIAGRAM: LAMB SHIFT,
G FACTOR, QUADRATIC ZEEMAN EFFECT****E.A. Prokhorchuk**

Санкт-Петербургский государственный университет
st068889@student.spbu.ru

Keywords: quantum electrodynamics, self-energy, atomic physics

Modern high-precision experiments aimed at measuring various properties of highly charged ions make it possible to test the theoretical methods of bound-state quantum electrodynamics (QED). In particular, high precision experiments to measure the g factor of hydrogenlike ions have achieved an accuracy of 10^{-11} [1]. To obtain theoretical predictions with the appropriate accuracy, it is necessary to take into account QED effects when considering various atomic characteristics.

One of the most important QED effects is given by the self-energy (SE) correction to energy levels, the g factor, the quadratic Zeeman effect, etc. *Ab initio* calculations of highly charged ions have to be performed to all orders in the electron-nucleus coupling parameter. The theoretical uncertainty is mainly determined by the slow convergence of partial-wave decompositions [2, 3]. For high-precision calculations the Green's function for an electron in the central field obtained by solving a corresponding system of differential equations has proven to be extremely useful [4, 5].

In this work, a study of the electron Green's function with one and two interactions with an external field is carried out. Potentials of a general form that do not preserve angular quantum numbers are considered, and expressions for the radial Green's functions are derived. The obtained formulas can be used to accurately calculate various one and two-electron SE corrections. The performance of the method is demonstrated by calculating the SE contribution to the Lamb shift in hydrogenlike ions.

The work was supported by the Russian Science Foundation, Grant № 22-22-00370.

Literature:

1. Häffner H. et al. High-Accuracy Measurement of the Magnetic Moment Anomaly of the Electron Bound in Hydrogenlike Carbon // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 5308.
2. Yerokhin V. A. et al. Two-electron self-energy corrections to the $2p_{1/2} - 2s$ transition energy in Li-like ions // *Phys. Rev. A.* 1999. V. 60. P. 3522.
3. Yerokhin V. A. et al. Evaluation of the self-energy correction to the g -factor of S states in H-like ions // *Phys. Rev. A.* 2004. V. 69. P. 052503.
4. Mohr P. et al. QED corrections in heavy atoms // *Phys. Rep.* 1998. V. 293. P. 227.
5. Yerokhin V. A., Maiorova A. V. Calculations of QED effects with the Dirac Green function // *Symmetry* 2020. V. 12. P. 800.

СРОР КАК АЛГОРИТМ УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИОННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ

Румянцев А.С., Олейниченко А.В., Зайцевский А.В., Титов А.В.
Магистрант 1 года обучения
физического факультета СПбГУ

Научный руководитель:
Титов А.В., д.ф.-м.н.,
профессор кафедры квантовой механики
физического факультета СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
attoatom@gmail.com

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 гранта № 19-72-10019.

Литература:

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.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА УСИЛЕНИЯ АНАПОЛЬНОГО МОМЕНТА В КАТИОНЕ МОНООКСИДА КРЕМНИЯ SiO^+

Турченко П.Д.,
бакалавр 4 года обучения,
кафедра квантовой механики,
физический факультет СПбГУ,
ст.лаб., лаб.иссл. ЛКХ ОПР НИЦ КИ — ПИЯФ

Научный руководитель:
Скрипников Л.В.,
доц., кафедра квантовой механики,
физический факультет СПбГУ,
к.ф.-м.н., с.н.с., ЛКХ ОПР НИЦ КИ — ПИЯФ

*Санкт-Петербургский государственный университет
НИЦ «Курчатовский Институт» — ПИЯФ
p.d.turchenko@vk.com*

Ключевые слова: анапольный момент, P-чётность, молекула SiO^+

Анапольный момент (анаполь) — один из электромагнитных моментов, появляющихся в мультипольном разложении векторного потенциала распределения тока [5]. Анаполь возникает внутри атомных ядер с ненулевым спином в результате взаимодействий, нарушающих пространственную чётность, поэтому его изучение важно для развития теории пространственно-нечётных взаимодействий в атомных ядрах.

На текущий момент значение анапольного момента с большой погрешностью было получено в эксперименте по исследованию атома ^{133}Cs [4], а также установлено граничное значение в ядре ^{19}F молекулы $^{138}\text{Ba}^{19}\text{F}$ [1].

Многообещающим представляется поиск анаполя в двухатомных молекулах благодаря присутствию в них близких по энергии вращательных уровней противоположной чётности [2,3]. В связи с этим в настоящей работе изучалась молекула $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$.

В данной работе в рамках полностью релятивистских подходов описания многоэлектронных систем было вычислено значение коэффициента усиления анапольного момента ядра ^{29}Si в молекуле SiO^+ . Полученный коэффициент, а также соответствующий эксперимент, необходимы для извлечения значения анапольного момента в этой молекуле.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-72-10019-П.

Литература:

1. DeMille D. et al. Using Molecules to Measure Nuclear Spin-Dependent Parity Violation // Phys. Rev. Lett. 2018. № 100. P. 023003.
2. Flambaum V. V. & Khriplovich I. B. On the Enhancement of Parity Nonconserving Effects in Diatomic Molecules // Phys. Lett. 1985. № 110A. P. 121—125.
3. Sushkov O. P. & Flambaum V. V. Parity Breaking Effects in Diatomic Molecules // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1978. № 75, P. 1208—1213.
4. Wood C.S. et al. Measurement of Parity Nonconservation and an Anapole Moment in Cesium // Science. 1977. № 275. P. 1759—1763.
5. Zel'dovich Ia. B. Electromagnetic Interaction with Parity Violation // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1958. № 33. P. 1531—1533.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ, СОДЕРЖАЩИХ ЛАНТАНОИДЫ

Хадеева П.А.,
Магистрант 1 года обучения
физического факультета СПбГУ

Научный руководитель: Титов А.В.,
д.ф.-м.н., профессор кафедры квантовой механики
физического факультета СПбГУ

*Санкт-Петербургский государственный университет
poliakhadeyeva@gmail.com*

Ключевые слова: метод связанных кластеров, релятивистский псевдопотенциал, лантаноиды.

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 гранта № 20–13–00225.

Литература:

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.

© П.А. Хадеева, А.В. Титов, 2023

Устные доклады

Секция 2. Оптика, лазерная физика и
спектроскопия.

OPTICAL SPECTROSCOPY OF GaAs/AlGaAs QUANTUM DOTS

Bashegurova E.A.,

3rd year undergraduate student,

physics department

Deribina E.I.,

1st year postgraduate student,

physics department

Scientific supervisor:

Kapitonov Yu.V., Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
docent, Department of Photonics, Laboratory of Crystal Photonics

St.-Petersburg State University,

bashegurovaelena@yandex.ru

Studying structures based on GaAs/AlGaAs is of interest because the lattice constant values of the material of the dot and its barrier are similar, leading to low internal stress in the sample. Low-temperature photoluminescence (PL) spectra contains several resonances related to different quantumized structures. However, attribution of all peaks to corresponding structures is not present in the literature. In [1] two spectrally-resolved ensembles of QDs were studied (dots A and dots B). However, the origin of these two ensembles was not understood. In this work we were able to find the spatial correlation between these two ensembles. So, dots A are quantum dots and B are quantum size structures associated with the objects being studied. The main aim of our work was to determine which part of the sample structure corresponds to certain parts of the spectrum, as well as how these objects are interacting in the semiconductor.

A sample T874 containing sparsely located dots was grown according to recipe described in [1]. The sample was grown using the droplet epitaxy method in our laboratory, which allows for control of the growth process, resulting in samples with precisely defined parameters. After conducting all the experiments, which is: obtaining PL, micro-PL and reflectivity spectra, finding the temperature dependence of the PL intensity, scanning the sample surface it can be said which peaks belong to which structure on the photoluminescence graph of semiconductor (Fig. 1, a).

In Fig. 1, a, the following resonances for PL spectra (red curve) were distinguished (starting from the low-energy): carbon contamination of the sample, three-dimensional crystalline structure of gallium arsenide, QDs A, QDs B1 and B2, quantum well (QW), and AlGaAs barrier with 38% aluminium content.

Also, on reflectivity spectra (blue curve), two resonances corresponding to (starting from low energy) heavy-hole excitons and light-hole excitons in QW are observed. The emission from QW is seen only from the lowest lying QW HH state.

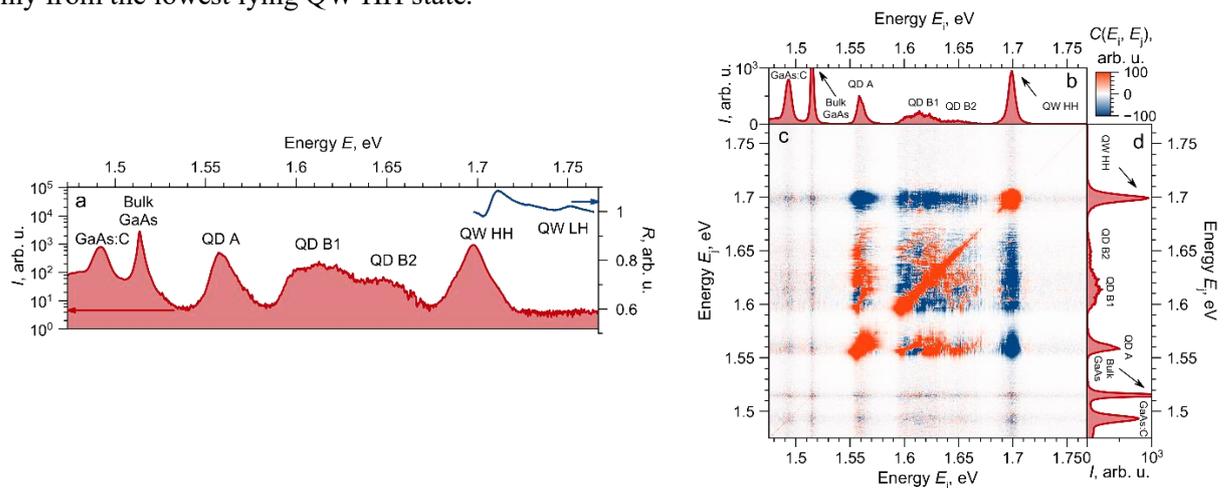


Fig. 1. (a) The averaged PL spectrum ($T = 4$ K, red curve, log scale) and the reflectivity spectrum ($T = 10$ K, blue curve). (b, d) The PL spectrum $I(E)$ averaged along the x axis taken at $T = 4$ K. (c) Correlation map $C(E_i, E_j)$.

To establish the nature of three types of QD, we studied spatial dependence of the micro-PL spectra by scanning the sample's surface with laser. From each part of semiconductor, we've got its own micro-PL

spectra, and in order to find relation between emission bands the correlation map $C(E_i, E_j)$ was constructed in Fig. 1, c: the elements on the diagonal of the correlation map are averaged values of the squared spatial derivatives, the off-diagonal elements represent relation between different emission bands. Regions where there is correlation between different emission bands are shown in red, anticorrelation regions are shown in blue, and regions, where emission is constant, non-correlated or equals zero are shown in white. Correlation map helps to establish QD A as studied QDs, and QDs B1 and QDs B2 as other quantum-sized objects, located near to the bigger QDs type A.

The result of the conducted research was the description of the photoluminescence spectra from a GaAs/AlGaAs semiconductor sample with quantum dots. The spectrum description in [1] was supplemented, and quantum dots of two different types turned out to be quantum dots and smaller quantum-sized structures, located around nanohole.

This work was carried out on the equipment of the SPbU Resource Center "Nanophotonics, and was supported by the RFBR project 19-52-12046 and by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Megagrant no. 075-15-2022-1112).

References:

1. Ulhaq A., Duan Q., Zallo E., Ding F., Schmidt O. G., Tartakovskii A. I., Skolnick M. S., and Chekhovich E. A. Vanishing electron g factor and long-lived nuclear spin polarization in weakly strained nanohole-filled GaAs/AlGaAs quantum dots // Phys. Rev. B 93. 165306.

АНАЛИЗ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ ПАЦИЕНТОВ С МНОЖЕСТВЕННОЙ МИЕЛОМОЙ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ НАРУШЕННОГО ПОЛНОГО ВНУТРЕННЕГО ОТРАЖЕНИЯ

Карташова А.Д.¹, Плотникова Л.В.¹, Поляничко А.М.^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный университет

²Институт цитологии Российской академии наук

Санкт-Петербургский государственный университет

st076251@student.spbu.ru

Ключевые слова: множественная миелома, вторичная структура белка, ИК-спектроскопия.

Множественная миелома (ММ) — это онкогематологическое заболевание, характеризующееся бесконтрольным размножением клональных злокачественных плазматических клеток в костном мозге, что приводит к избыточной продукции одного из типов иммуноглобулинов или их фрагментов, например, свободных легких цепей. Такие иммуноглобулины называются "парапротеинами" или "М-протеинами". Это заболевание составляет примерно 10% всех онкогематологических заболеваний и является неизлечимым.

Работа посвящена разработке скрининговой методики, направленной на выявление признаков множественной миеломы, основанной на анализе ИК-спектров сыворотки крови. Данные о вторичной структуре белков получали методом ИК спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения, не требующим предварительной пробоподготовки, и анализа второй производной спектров ИК-поглощения. Измерения и анализ проводились для образцов в виде водных растворов и высушенных пленок. На основании полученных результатов были предложены количественные критерии быстрого разделения образцов сыворотки крови по наличию или отсутствию патологического белка, характерного для данного заболевания. При этом образцы могут быть представлены, как в виде раствора, так и в виде высушенной пленки.

На основе анализа второй производной полученных спектров установлено, установлено, что среднее содержание α -спиральных участков в сыворотке крови больных множественной миеломой уменьшается на 13—17% по сравнению со здоровыми донорами, тогда как среднее содержание β -структур увеличивается на 7—13%.

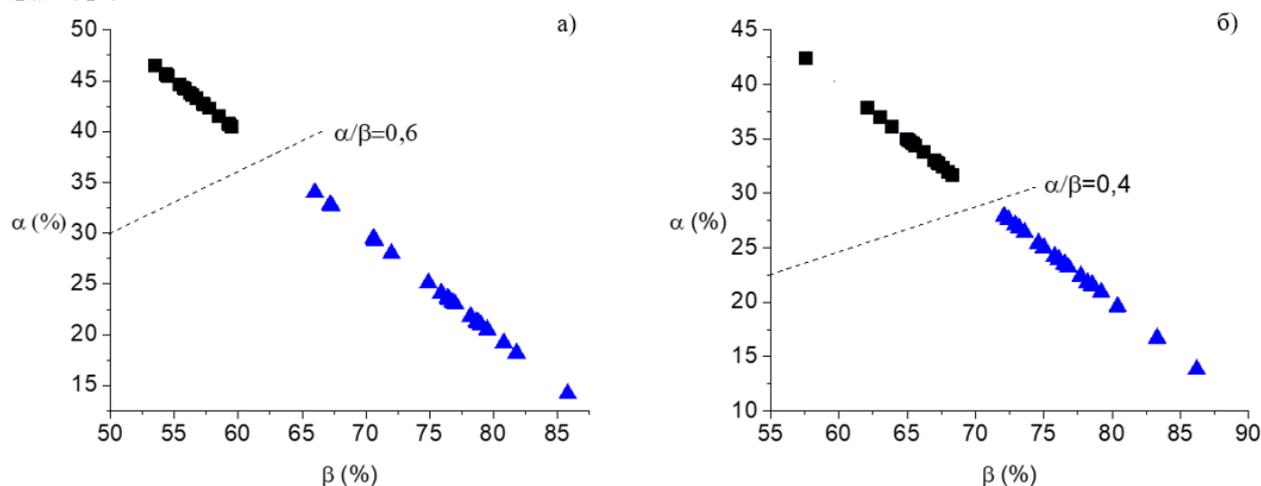


Рисунок 1. Точки, соответствующие содержанию α -спиралей и β -структур в образцах сыворотки крови здоровых доноров (квадраты) и больных секретирующей формой ММ (треугольники): а) в виде раствора, б) в виде высушенной пленки

Также был проведен сравнительный анализ эффективности рассматриваемого подхода для образцов в жидком состоянии и в виде пленок, высушенных на кристалле (Рис. 1). Было установлено, что для точек, соответствующих образцам сыворотки крови здоровых доноров, значения отношения α/β лежат в диапазоне $0,68 \div 0,87$ для жидких образцов и в диапазоне $0,46 \div 0,74$ для высушенных пленок. Для образцов сыворотки крови пациентов с секретирующей формой ММ

значения этого отношения составляют $0,17 \div 0,42$ и $0,16 \div 0,39$ для жидких образцов и пленок соответственно.

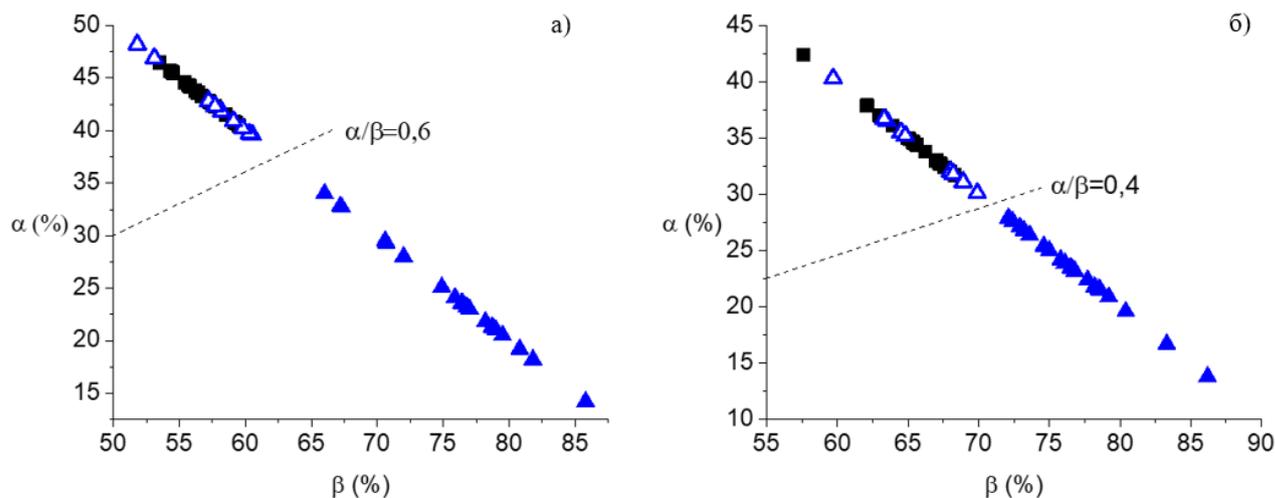


Рисунок 2. Точки, соответствующие содержанию α -спиралей и β -структур в образцах сыворотки крови больных ММ, в которых секрция парапротеина не была выявлена (полые треугольники): а) в виде раствора, б) в виде высушенной пленки

Часть точек, соответствующих образцам больных ММ, в которых секрция парапротеина не была выявлена, попала в область здоровых доноров (Рис. 2).

Таким образом, было показано, что используемый подход позволяет разделить группы здоровых доноров и пациентов с секреторирующей формой ММ по содержанию α -спиралей и β -слоев во вторичной структуре образцов. На основании полученных результатов можно сделать вывод, что предложенный подход пригоден для выявления признаков ММ при условии наличия парапротеина в образцах сыворотки крови.

ГЕНЕРАЦИЯ И ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ПУЧКОВ С ОРБИТАЛЬНЫМ УГЛОВЫМ МОМЕНТОМ В МОДЕ ЛАГЕРРА-ГАУССА

Король Т.К.,
студент 3 курса бакалавриата

Малютина Е. В.
студентка 3 курса бакалавриата

Научный руководитель:
Петров В. М., д.ф.-м.н.,
профессор кафедры общей физики 1, СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
koroltim25@gmail.com

Исследования в области пучков с орбитальным угловым моментом (ОУМ) в настоящее время представляет интерес по нескольким причинам. Во-первых, они обладают свойствами, упрощающими восстановление их профиля после прохождения атмосферных турбулентностей [1], что является полезным при передаче информации по воздушным оптическим линиям связи. Во-вторых, ОУМ может принимать любое целочисленное значение, что даёт дополнительную степень свободы и, как следствие, большую пропускную способность при передаче информации.

На сегодняшний день существует несколько способов генерации пучков с ОУМ, например, с использованием цилиндрических линз [2], с помощью q-пластин [3], спиральных фазовых пластин [4] или пространственного модулятора света (spatial light modulator, SLM). Преимущество последнего метода заключается в возможности быстро переключать моды, не переставляя компоненты в оптической схеме. Способ генерации фазовых масок для SLM описан в [5].

Для использования пучков с ОУМ с целью передачи информации требуется измерять амплитудный и фазовый профиль. Если регистрация амплитуды может быть выполнена достаточно просто (с помощью двумерной ПЗС-камеры), то измерение фазы требует усовершенствования детектирующей схемы таким образом, чтобы происходило сложение детектируемого пучка с гауссовым, что и было сделано нами в данной работе. Нами была предложена и экспериментально реализована оригинальная схема, позволяющая регистрировать искомую интерференционную картину.

В ходе эксперимента была получена интерференционная картина (рис. 1.б), в центре которой видна “вилка” — область, в которой интерференционная полоса раздваивается, что и является признаком наличия у пучка орбитального углового момента.

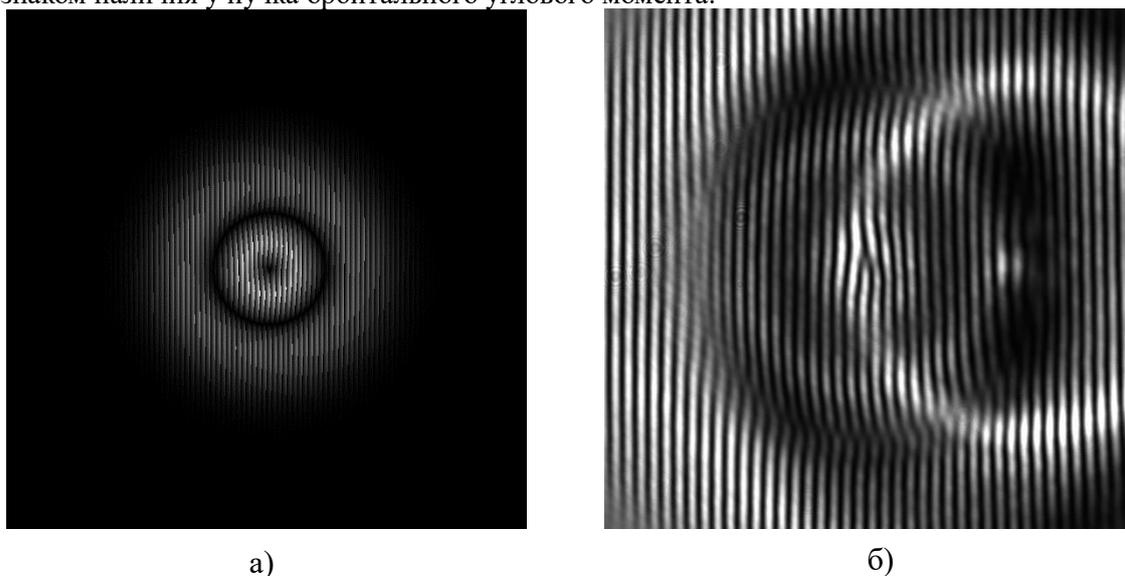


Рис. 1. а) – фазовая маска для генерации пучка LG_1^1 , б) – результат интерференции опорной и предметной волн

Литература:

1. Nisar Ahmed, Zhe Zhao, Long Li, Hao Huang, Martin P. J. Lavery, Peicheng Liao, Yan Yan, Zhe Wang, Guodong Xie, Yongxiong Ren, Ahmed Almainan, Asher J. Willner, Solyman Ashra, Andreas F. Molisch, Moshe Tur & Alan E. Willner. "Mode-Division-Multiplexing of Multiple Bessel-Gaussian Beams Carrying Orbital-Angular-Momentum for ObstructionTolerant Free-Space Optical and Millimetre-Wave Communication Links."2016.
2. M.W. Beijersbergen, L. Allen, H.E.L.O. van der Veen, J.P. Woerdman, Optics Comm. 96 (1993) 123.
3. L. Marrucci, C. Manzo, and D. Paparo, "Optical spin-to-orbital angular momentum conversion in inhomogeneous anisotropic media."Phys. Rev. Lett. 96(16), 163905 (2006).
4. G.A. Turnbull D.A. Robertson GM. Smith L. Allen M.J. Padgett. The generation of freespace Laguerre-Gaussian modes at millimetre-wave frequencies by use of a spiral phaseplate // Optics Communication. 1996. 127. №. 183188.
5. Exact solution to simultaneous intensity and phase encryption with a single phase-only hologram / E. Bolduc, N. Bent, E. Santamato et al. // Optics Letters. 2013. Vol. 38, no. 18. Pp. 35463549.

© Т.К. Король, Е.В. Малютина, В.М. Петров, 2023

ПРИМЕНЕНИЕ ФОСФИНСЕЛЕНИДОВ В КАЧЕСТВЕ ЯМР ЗОНДОВ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ГАЛОГЕННОЙ СВЯЗИ

Крутин Д.В.,
магистрант 2 года обучения
Института химии СПбГУ

Захаров А.С.,
студент 3 курса бакалавриата
Института химии СПбГУ

Научный руководитель:
Муллоярова В.В.,
к.х.н., ассистент,
кафедра ФОХ, Институт химии СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
krutin.chem@gmail.com

Галогенная связь (ГС) — это притягательное взаимодействие между электрофильной областью на атоме галогена (так называемой σ -дыркой) и нуклеофильной областью на богатом электронной плотностью атоме или молекулярном фрагменте. ГС применяют в разных областях науки, например, для самосборки супрамолекулярных структур [1] и разработки органокатализаторов [2].

Широкое применение в изучении невалентных взаимодействий находит спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), позволяющая проводить исследования в газе, жидкости и твёрдом теле. Однако возможности данного метода для исследования ГС ограничены вследствие того, что магнитно-активные изотопы большинства галогенов ($^{35,37}\text{Cl}$, $^{79,81}\text{Br}$, ^{127}I) обладают квадрупольным моментом и не подходят для спектроскопии ЯМР высокого разрешения. В связи с этим актуальной проблемой является разработка новых комбинированных подходов к изучению ГС.

В данной работе в качестве дескриптора ГС предложено использовать спектральные параметры ЯМР галоген-акцепторных молекул — фосфинселенидов R_3PSe ($\text{R}=\text{Me}$, Et , ^tBu , Ph), которые содержат в своем составе два магнитно-активных ядра и, как следствие, позволяют наблюдать не только изменения химических сдвигов ^{31}P и ^{77}Se , но и их прямой константы спин-спинового взаимодействия $^1J(^{31}\text{P}, ^{77}\text{Se})$ (КССВ). ЯМР исследования проводились как в твёрдом теле, так и в растворе в смеси сжиженных дейтерированных газов фреонов $\text{CDF}_3/\text{CDF}_2\text{Cl}$ при температуре 100 К.

Геометрия комплексов с ГС в твердом теле была определена с помощью рентгеноструктурного анализа (РСА) монокристаллов (рис. а, б). Для качественной оценки параметров в растворе был разработан квантово-химический подход: оптимизация геометрии проводилась с явным учетом растворителя для насыщения координационной сферы атома селена (рис. в, г). Для согласованности полученных квантово-химическим путем геометрий комплексов с экспериментальными данными также были рассчитаны ЯМР параметры для рассмотренных систем.

Полученные результаты показали, что образование ГС с фосфинселенидами приводит к дезэкранированию ядра ^{77}Se за счёт стягивания электронной плотности на атом галогена (рис. д). В результате чего происходит увеличение длины связи $\text{P}=\text{Se}$ и, как следствие, уменьшение прямой КССВ $^1J(^{31}\text{P}, ^{77}\text{Se})$. Ядро ^{31}P при этом остаётся менее чувствительным к образованию ГС. В растворе, помимо образования ГС, возможно взаимодействие R_3PSe с π -системой донора ГС. Однако результаты расчетов показали, что в данном случае наблюдается экранирование ядра ^{77}Se за счёт магнитной анизотропии бензольного кольца (рис. е). Таким образом, полученные экспериментальные и рассчитанные изменения спектральных характеристик фосфинселенидов свидетельствует об образовании прочных ГС, сохраняющихся при переходе от твёрдого тела к раствору.

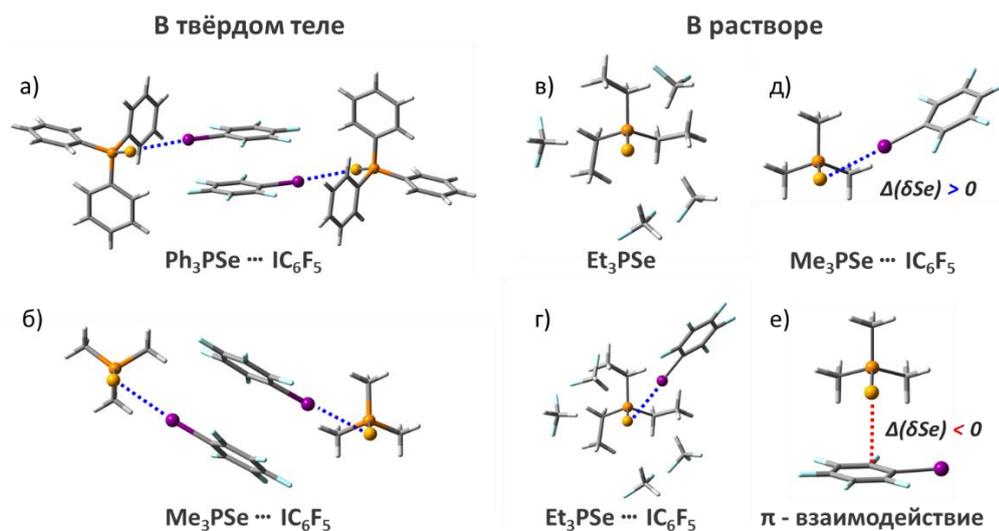


Рис. Структуры сокристаллов йодпентафторбензола (IC_6F_5) с а) Ph_3PSe и б) Me_3PSe по данным РСА. Равновесные геометрии в) Et_3PSe и г) его комплекса с IC_6F_5 , полученные с помощью квантово-химического подхода. Сравнение геометрий и изменений химического сдвига ^{77}Se при образовании д) галогенной связи $\text{Me}_3\text{PSe} \cdots \text{IC}_6\text{F}_5$ и е) взаимодействия с π -системой.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-73-00055.

Литература:

1. Dumele O. и др. Halogen Bonding Molecular Capsules // *Angew. Chemie – Int. Ed.* 2015. № 42, P. 12339–12344
2. Bulfield D. & Huber S. M. Halogen Bonding in Organic Synthesis and Organocatalysis // *Chem. Eur. J.* 2016, № 41. P. 14434–14450.

СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ОПЕРАТОРА ФАЗЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЯ В КВАНТОВОЙ ИНФОРМАТИКЕ

Лосев С.В.

Бакалавр 4 года обучения
физического факультета

Научный руководитель:
Вашукевич Е.А., к.ф.-м.н.,
доцент, кафедры общей физики-1

Санкт-Петербургский государственный университет
st086845@student.spbu.ru

В настоящий момент научное сообщество испытывает огромный интерес к квантовым вычислениям по многим причинам. Одна из наиболее важных – сложность в применении классического принципа вычислений к решению задач «экспоненциального» класса, поскольку время на решения таких задач классическими алгоритмами растёт экспоненциально с ростом числа входных данных. Также применение квантовых вычислений сокращает время и ресурсы при моделировании физических, химических и биологических процессов.

На сегодня одной из самых многообещающих моделей квантовых вычислений является модель вычислений в дискретных переменных, использующий дискретные степени свободы квантовых систем в качестве базисных логических состояний, вычислительный процесс же строится на последовательном применении унитарных операций ко входному набору квантовых битов. Однако, при практической реализации любого протокола неизбежны ошибки, связанные с не идеальностью каналов передачи информации или неточностью проводимых операций.

Большим потенциалом для проведения устойчивых к ошибкам квантовых вычислений обладают методы с использованием бозонных кодов коррекции ошибок [1]. Для построений таких кодов могут быть использованы состояния Пегга-Барнетта [2], которые являются вполне корректно определёнными собственными состояниями эрмитовского оператора фазы.

В представленной работе нами были изучены и проанализированы различные подходы к определению квантово-механического оператора фазы и собственных состояний этого оператора. Мы также планируем исследовать возможность использования других физических степеней свободы - азимутального угла в плоскости, поперечной оси распространения оптического пучка и проекции орбитального углового момента на ось распространения, для построения аналогичных состояний [3].

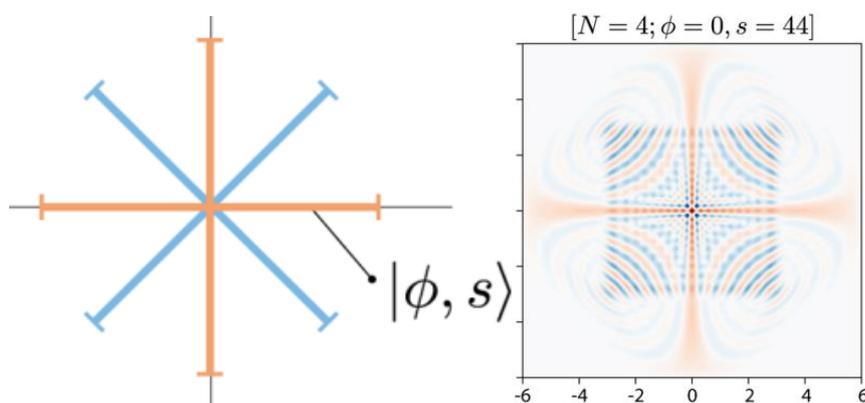


Рисунок 1. Иллюстрации состояний Пегга-Барнетта на фазовой плоскости (слева), Функция Вигнера одного из состояний Пегга-Барнетта (справа). Иллюстрации взяты из [1].

Литература:

1. Arne L. Grimsmo, Joshua Combes, and Ben Q. Baragiola, Quantum Computing with Rotation-Symmetric Bosonic Codes // PHYSICAL REVIEW X 10, 011058 (2020)
2. S. M. Barnett and D. T. Pegg, On the Hermitian Optical Phase Operator // Journal of Modern Optics, 36:1, 7-19 (1989).
3. Barnett S.M., Pegg D.T., Quantum theory of rotation angles // Phys. Rev. A. 1990. V.41. P.3427.

© С.В. Лосев, Е.А. Ващукевич, 2023

ОПТИМИЗИРОВАННОЕ УСТРОЙСТВО ГЕНЕРАЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ НАНОСКОПИИ В «ОКНЕ ПРОЗРАЧНОСТИ ВОДЫ»

А. В. Мурзина^{1,2}, Я.В. Ракшун^{2,3}, Ю. В. Хомяков²

¹Новосибирский государственный университет

²Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

³Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики

Новосибирский государственный университет

a.murzina@g.nsu.ru

Ключевые слова: синхротронное излучение, вставное устройство, эллиптический ондулятор, окно прозрачности воды.

В настоящее время существует значительный интерес к задаче непосредственного наблюдения молекулярных-клеточных процессов в динамике, требующих высокого пространственного и временного разрешения. Однако в случае использования таких методик, как макромолекулярная кристаллография или криоэлектронная микроскопия [3,4], органический объект исследования не является живым, а динамические исследования (например, с применением меток [2]) являются принципиально инвазивными. Задача принципиально может быть решена методами наноскопии в энергетическом диапазоне «окна прозрачности воды» ($\lambda = 2.3 - 4.3$ нм) [5]. Выполнение условий для реализации последнего возможно на источниках синхротронного излучения 4-го поколения.

Современные накопители источников СИ 4-го поколения, такие как строящийся ЦКП «СКИФ», имеют сверхнизкий эмиттанс (~ 100 пм·рад [1]), следствием чего является малый размер источника и высокая степень когерентности генерируемого излучения. В «окне прозрачности воды» применима оптика нормального падения с большой числовой апертурой ($\sim 0,3$) [5]. Используя такую оптику на станциях источников СИ 4-го поколения, можно добиться нанометрового разрешения и малого времени экспозиции исследуемого образца. Кроме того, существует возможность реализации когерентных методов, требующих меньшее число фотонов и позволяющих снизить получаемую биологическим объектом дозу.

В рамках данной работы проведено количественное сравнение возможностей различных вариантов вставных устройств, в частности, ондуляторов типа APPLE-II и Delta при разных режимах работы по следующим параметрам: угловой расходимости, спектральным характеристикам и доле когерентных фотонов. Найдены оптимальные длины магнитных периодов с точки зрения максимизации интенсивности излучения, генерируемого в «окне прозрачности воды». Рассчитаны мощностные характеристики генерируемого излучения и оценено влияние когерентных свойств излучения.

Результат работы будет включён в концептуальный проект (CDR) экспериментальной станции «Наноскоп», которая в полной мере сможет раскрыть потенциал источников излучения 4-го поколения для биологических исследований.

Литература:

1. Е.Б. Левичев [и др.]. Проект создания синхротронного источника поколения 4+ ЦКП «СКИФ» в р.п. Кольцово Новосибирской области: общая информация и статус реализации // Технологическая инфраструктура сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ», 2022. Т.1.
2. Н. Sahoo. Fluorescent Labeling Techniques in Biomolecules: A Flashback. // RSC Advances, Vol. 2, Pp 7017-7029, 2012.
3. В. Rupp. Macromolecular Crystallography: Overview // Encyclopedia of Biophysics. Springer, Berlin, Heidelberg, Pp 1346–1353, 2013
4. F. DiMaio, W. Chiu. Tools for Model Building and Optimization into Near-Atomic Resolution Electron Cryo-Microscopy Density Maps // Methods in Enzymology, Vol. 589, Pp 255-276, 2016
5. N. I. Chkhalo et al. X-ray Optical Scheme for Station “Nanoscope” for Biological Research in the Water Window // AIP Conference Proceedings 2299, 060005, 2020.

ГЕНЕРАЦИЯ НЕГАУССОВЫХ СОСТОЯНИЙ СВЕТА В СХЕМАХ С ИЗМЕРЕНИЯМИ

Пошевкина А.А.,
магистрант 2 года обучения
физического факультета

Научный руководитель: Королёв С.Б., к.ф.-м.н.,
ассистент кафедры общей физики I

Санкт-Петербургский государственный университет
st049468@student.spbu.ru

Ключевые слова: негауссовы состояния, генерация негауссовых состояний, негауссовость.

Представленная работа посвящена исследованию процесса генерации квантовых негауссовых состояний света в схемах с измерениями. Мотивация нашего исследования обусловлена тем, что такие состояния очень полезны в различных квантово-информационных протоколах. Во-первых, негауссовы состояния необходимы для выполнения универсальных вычислений в непрерывных переменных [1]. А также они используются в процедурах коррекции ошибок, позволяющих выполнять отказоустойчивые вычисления [2]. Кроме того, негауссовы квантовые состояния рассматриваются как потенциальный ресурс для квантовой криптографии и квантовой коммуникации [3]. Негауссовы состояния могут быть использованы для улучшения существующих протоколов квантовой оптики и квантовой информации. Например, в протоколе квантовой телепортации, используя вспомогательные негауссовы состояния, можно значительно уменьшить ошибку преобразования [4,5]. Все это указывает нам на высокую значимость негауссовых состояний, а также на актуальность исследования способов получения данных состояний.

В нашей работе мы исследуем две схемы генерации негауссовых состояний света. Схемы представлены на Рис. 1.

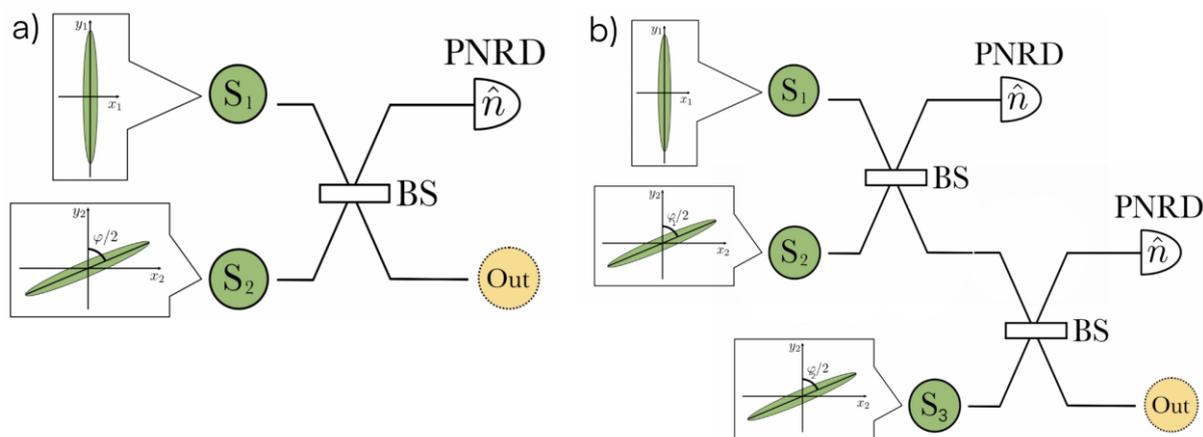


Рис.1. Исследуемые схемы: а) Схема генерации негауссова состояния Out с помощью измерения числа фотонов в одной моде двухмодового перепутанного состояния, которое получается с помощью смешения на светоделителе двух сжатых вакуумных состояний. б) Схема генерации с помощью измерения фотонов в двух модах трехмодового перепутанного состояния. На рисунке: S1, S2, S3 – сжатые вакуумные состояния; BS – светоделители; PNRD – детекторы, измеряющие число фотонов в моде; Out – выходное негауссово состояние.

Целью нашего исследования было – сравнить различные характеристики получаемых состояний в обеих схемах и определить оптимальные параметры входных состояний и установки для создания негауссовых состояний с наилучшими свойствами. Для этого нами было проведено численное моделирование таких величин как: отрицательность Вигнера и вероятность получения состояний в схеме. Мы показываем, что можно оптимизировать параметры схем так, чтобы получать полезные негауссовы состояния с максимальной вероятностью. Также стоит отметить, что в

представленных схемах можно генерировать квантовые состояния котов Шредингера. При этом в зависимости от параметров состояний вероятность их получения будет различна для разных схем.

Литература:

1. Francesco Albarelli, Marco G. Genoni, Matteo G. A. Paris, and Alessandro Ferraro. Resource theory of quantum non-Gaussianity and Wigner negativity // *Phys. Rev. A* 98, 052350. 2018.
2. J. Niset, J. Fiurášek, and N. J. Cerf. No-Go Theorem for Gaussian Quantum Error Correction. // *Phys. Rev. Lett.* 102, 120501. 2009.
3. J. Lee, J. Park, and H. Nha. Quantum non-Gaussianity and secure quantum communication. // *Quantum Information* 5, 49. 2019.
4. W. Asavanant, K. Takase, K. Fukui, M. Endo, J.-i. Yoshikawa, and A. Furusawa. Wave-function engineering via conditional quantum teleportation with a non-Gaussian entanglement resource. // *Phys. Rev. A* 103, 043701. 2021.
5. E. R. Zinatullin, S. B. Korolev, and T. Y. Golubeva. Teleportation protocols with non-Gaussian operations: Conditional photon subtraction versus cubic phase gate. // *Phys. Rev. A* 107, 022422. 2023.

© Королёв С.Б., Пошевкина А.А. 2023

НОВЫЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЛЮМИНОФОРЫ $\text{MYF}_4: \text{Eu}^{3+}$, $\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$

Причислый К.С.,
бакалавр 2 года обучения

Научный руководитель:
Мерещенко А.С., д.х.н., доцент

Санкт-Петербургский государственный университет
St106276@student.spbu.ru

В современной науке активно исследуются кристаллические наноматериалы неорганических веществ, легированных ионами лантаноидов. Изучение подобного рода соединений показало возможность их применения в качестве люминесцентных термометров, фотокатализаторов и сенсоров биологически важных веществ за счет проявления ими магнитных и люминесцентных свойств. Особый интерес представляет использование подобных веществ в медицине для терапии и диагностики различных заболеваний на ранних стадиях, в том числе рака, а также неинвазивной диагностики тканей с использованием МРТ. Из фторидных соединений редкоземельных элементов, наиболее хорошо изучены соединения типа $\text{NaY}_{1-x}\text{Ln}_x\text{F}_4$, легированные ионами различных лантаноидов, имеющие различные люминесцентные, магнитные и морфологические свойства в зависимости от лантаноида и его содержания в веществе. Обзор литературы показал, что наноматериалы типа $\text{NaY}_{1-x}\text{Ln}_x\text{F}_4$, содержащие другие щелочные металлы помимо натрия, изучены слабо. Поэтому, в нашей работе была поставлена цель - синтезировать и изучить свойства люминофоров состава $\text{MYF}_4: \text{Eu}^{3+}$ ($\chi(\text{Eu}) = 0-100$ ат. %).

Наночастицы были синтезированы гидротермальным методом при температуре 180 °С. Было показано, что фазовый состав меняется в зависимости от щелочного металла и концентрации европия. Образцы $\text{KYF}_4: \text{Eu}^{3+}$ имеют кубическую сингонию, структурный тип KY_3F_{10} вне зависимости от концентрации европия. Образцы $\text{RbYF}_4: \text{Eu}^{3+}$ имеют орторомбическую сингонию, структурный тип RbSm_2F_7 при концентрации европия 0 – 10% и кубическую сингонию, структурный тип $\text{RbSm}_3\text{F}_{10}$ при концентрации европия 20 – 100%. Образцы $\text{CsYF}_4: \text{Eu}^{3+}$ имеют орторомбическую сингонию, структурный тип CsY_2F_7 при концентрации европия 0 – 80% и гексагональную сингонию, структурный тип EuF_3 при концентрации европия 100%. Также для образцов с цезием при 80% содержания европия наблюдалась примесь структурного типа YF_3 гексагональной сингонии. Параметры элементарной ячейки почти не меняются у веществ одной фазы и сильно меняются при переходах к другим фазам.

Анализ спектра люминесценции показал, что при возбуждении на 395 нм все образцы проявляют люминесценцию, соответствующую f-f переходам иона Eu^{3+} . Для каждой серии образцов максимум интенсивности соответствует содержанию ионов европия 30 ат. %. Спектры люминесценции каждой серии образцов указывают на уникальную тонкую структуру полос люминесценции в зависимости от фазы.

Для каждой кристаллической фазы с возрастанием концентрации европия наблюдается монотонный рост среднего размера частиц. Самые маленькие частицы наблюдаются для образцов с калием: 20 – 60 нм в диаметре. Частицы образцов с рубидием имеют диаметр 20 – 220 нм. Частицы образцов с цезием имеют диаметр 60 – 2000 нм.

Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Нанотехнологии», «Оптические и лазерные методы исследования вещества», «Термогравиметрические и калориметрические методы исследования», «Криогенный отдел», «Методы анализа состава вещества», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Инновационные технологии композитных наноматериалов», «Магнитно-резонансные методы исследования». Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (МД-1191.2022.1.3).

Литература:

1. Kolesnikov I. E. и др. The effect of Eu^{3+} and Gd^{3+} co-doping on the morphology and luminescence of $\text{NaYF}_4:\text{Eu}^{3+}$, Gd^{3+} phosphors // New Journal of Chemistry. 2021. Т. 45. № 24. С. 10599–10607.

© К.С. Причислый, А.С. Мерещенко, 2023

Устные доклады
Секция 3. Физика конденсированного
состояния.

ИССЛЕДОВАНИЕ АНИОННОГО ОБМЕНА В СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДАХ НА ОСНОВЕ ЦИНКА

Василевич Е.Д.,

магистрант 2 года обучения физического факультета, СПбГУ

Научный руководитель:

Юзвюк М.Х., к.ф.-м.н.,
н. с., НИЦ КИ ПИЯФ

Санкт-Петербургский государственный университет st110788@student.spbu.ru

Одним из интересных свойств слоистых двойных гидроксидов (СДГ) является способность к анионному обмену. Эта особенность заключается в возможности замещения аниона изначально синтезированного СДГ на анион среды. Из-за способности к анионному обмену слоистые двойные гидроксиды рассматриваются в качестве перспективных соединений для использования в областях катализа, доставки лекарств, производства сорбентов и антикоррозионных покрытий [1]. Структурно СДГ состоят из положительно заряженных слоёв, содержащих гидроксиды из двух (иногда более) различных катионов металлов, между слоями могут находиться органические и неорганические соединения в анионных формах и вода. Большинство СДГ описываются формулой $[M_{1-x}^{II}M_x^{III}(OH)_2]^{x+}[A^{n-}]_{x/n} \cdot yH_2O$, где M - катионы металлов, A – межслойный анион.

В данной работе исследовалось изменение межплоскостных расстояний в процессе реакций анионного обмена $Zn - \text{СДГ} - NO_3 \rightarrow Zn - \text{СДГ} - Cl$ и $Zn - \text{СДГ} - NO_3 \rightarrow Zn - \text{СДГ} - CO_3$. Хотя исследования данных соединений уже проводились [2], их анионообменные свойства нуждаются в дальнейшем изучении. Искомые зависимости были получены в результате обработки экспериментальных данных рассеяния синхротронного излучения на исследуемых образцах. Монотонный характер зависимостей позволяет сделать вывод об отсутствии структурных изменений исследуемых СДГ в процессе реакции анионного обмена. В дальнейшем будет проводиться уточнение структуры соединения $Zn - \text{СДГ} - CO_3$, описываемого ромбоэдрической пространственной группой $R\bar{3}m$.

Литература:

1. Mishra G., Dash B., Pandey S., Layered double hydroxides: A brief review from fundamentals to application as evolving biomaterials, Applied Clay Science, Volume 153, 2018, Pages 172-186
2. Bouali A.C. et al., Zn-Al LDH growth on AA2024 and zinc and their intercalation with chloride: Comparison of crystal structure and kinetics, Applied Surface Science, Volume 501, 2020, 144027

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ АТОМНО-ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ [Ni(SALEN)] И [Cu(SALEN)]: СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПО ДАННЫМ МЕТОДОВ XPS, UV PES И DFT

Гаас В.А.¹, Петрова О.В.¹, Сивков Д.В.¹, Левин О.В.¹, Верещагин А.А.¹, Катин К.П.²,
Корусенко П.М.¹ и Виноградов А.С.¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Санкт-Петербургский государственный университет

gaas.va@yandex.ru

Ключевые слова: плоско-квадратные комплексы [Ni(Salen)] и [Cu(Salen)]; электронная структура; рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS); ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия (UV PES); теория функционала плотности (DFT)

Электропроводящие полимеры на основе комплексов переходных металлов (М) с основаниями Шиффа ([M(Schiff)]) обладают большим практическим потенциалом и находят применение в катализе, сенсорных технологиях и энергетике благодаря возможности настройки их свойств путем варьирования металлического центра и атомов лигандов [1]. Среди таких полимеров широкое распространение получили полимеры, электрохимически синтезируемые из мономерных комплексов переходных металлов с лигандами на основе тетрадентатных N₂O₂-оснований Шиффа, которые известны как саленовые комплексы (сален – N,N'-бис(салицилальдегид)этилендиамин, C₁₆H₁₄N₂O₂). Схематическое изображение комплексов [M(Salen)] представлено на рисунке 1. Координационные центры таких комплексов способны к обратимым окислительно-восстановительным (редокс) реакциям, а полимеризация приводит к повышенной делокализации сопряженных π-связей, что обуславливает свойства этих полимеров. Для изучения механизмов редокс реакций, протекающих в полимерах на основе [M(Salen)], необходима детальная информация об атомно-электронном строении их мономерных комплексов.



Рис. 1. Схематическое изображение комплексов [M(Salen)]:
M = Ni, Cu [1]

Целью настоящей работы является определение зарядового (химического) состояния атомов лиганда (С, N, O) и атома 3d-металла (Ni, Cu) в комплексах [Ni(Salen)] и [Cu(Salen)], а также выяснение роли 3d-электронов металла в формировании электронной структуры указанных соединений. Для этого проведено сравнительное экспериментально-теоретическое исследование атомного и электронного строения комплексов [Ni(Salen)], [Cu(Salen)] и свободной (без атома

металла) молекулы салена H₂(Salen) с использованием методов рентгеновской фотоэлектронной (XPS) и ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (UV PES), дополненных квантово-химическими расчетами, которые выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT).

Измерения XPS и UV PES спектров были выполнены с использованием лабораторного спектрометра Thermo Fisher Scientific ESCALAB 250 Xi в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Научного парка СПбГУ. Спектры регистрировались *in situ* для тонких слоев мономеров толщиной ~10-50 нм, приготовленных путем термического испарения порошка соответствующего мономера ([Ni(Salen)] или [Cu(Salen)]) в вакууме (~10⁻⁹ мбар) с последующим осаждением на поликристаллическую Pt подложку. Расчеты атомной и электронной структуры изолированной молекулы H₂(Salen) и молекулярных комплексов [Ni(Salen)] и [Cu(Salen)] методом DFT были выполнены с использованием пакета GAMESS-US и визуализированы с помощью программного обеспечения ChemCraft.

В результате исследования установлено, что химическое связывание атомов лиганда и металла приводит к сдвигам энергии связи 1s-электронов всех атомов лиганда в комплексе по сравнению с атомами свободной молекулы. Величины энергетических сдвигов для [Ni(Salen)] составили +1.0 и +1.1 эВ для C1s- (в зависимости от химического состояния атомов углерода), +1.9 эВ для N1s- и -0.4 эВ для O1s-электронов. Величины сдвигов для [Cu(Salen)] оказались равными

+0.7 и +1.0 эВ для C1s-, +1.5 эВ для N1s-, -0.5 эВ для O1s-электронов. Вместе с тем, энергии связи Ni2p_{3/2}- и Cu2p_{3/2}-уровней в молекулярных комплексах по сравнению с NiO и CuO, смещены на +1.3 эВ и +1.7 эВ соответственно [2]. Таким образом, можно заключить, что образование координационной связи между атомами металла и лиганда приводит к сильному перераспределению электронной плотности на атомах как в координационном центре [MO₂N₂], так и в лиганде (атомы С) в результате участия валентных 3d- и 4s-электронов атома металла в [M(Salen)] в σ- и π-связывании с атомами саленового лиганда, причем π-связывание, по всей видимости, имеет место для атома М не только с соседними атомами азота и кислорода, но и периферийными атомами углерода. Следует также отметить, что для [Ni(Salen)] зарядовое перераспределение оказывается более выраженным.

Выявлены различия в области локализации 3d-атомных орбиталей (АО) металлов в валентной зоне: Cu3d АО вносят вклад в молекулярные орбитали (МО) комплекса [Cu(Salen)] в диапазоне энергий связи от 2 до 4 эВ и от 6 до 11 эВ, тогда как Ni3d АО вносят доминирующий вклад в МО в [Ni(Salen)] в диапазоне энергий связи от 3.6 до 8 эВ. Такое широкое энергетическое распределение занятых МО (от 2 до 11 эВ) с вкладами Ni (Cu) 3d-АО можно объяснить низкой симметрией молекулярных комплексов.

Работа выполнена в рамках гранта РФФ №21-72-10029.

Литература:

1. Freire C., Nunes M., Pereira C., Fernandes D. M., Peixoto A. F., Rocha M. Metallo(salen) complexes as versatile building blocks for the fabrication of molecular materials and devices with tuned properties // Coord. Chem. Rev. 2019. Vol. 394. P. 104-134.
2. NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database, NIST Standard Reference Database Number 20; National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg, MD, USA, 2012.

© В.А. Гаас, О.В. Петрова, Д.В. Сивков, О.В. Леви, А.А. Верещагин, К.П. Катин, П.М. Корусенко, А.С. Виноградов, 2023.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОПОРИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ СОСТАВА $MnSe-CuInSe_2$ НА ПОСТОЯННОМ ТОКЕ ОТ ВОЗДЕЙСТВИЯ ОСВЕЩЕННОСТИ И ВЛАЖНОСТИ

Диденко Е.А.^{1,2,*}, Doroshkevich A.S.^{2,3}, Samedovaa U. F.^{2,9}, Kirillov A.K.², Vasilenko T.A.⁴, Oksengendler B.L.⁵, Nikiforova N.N.⁵, Balasoui M.^{2,4}, Mardare D.⁸, Mita C.⁸, Stanculescu A.⁷ Nicoileta Cornei⁸

¹Dubna State University

²Joint Institute for Nuclear Research

³Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin

⁴Saint-Petersburg Mining University

⁵Ion-plasma and laser technologies Institute after U.Arifov

⁶Horia Hulubei National Institute for R&D in Physics and Nuclear Engineering (IFIN-HH)

⁷"Alexandru Ioan Cuza" University of Iasi, Faculty of Physics

⁸National Institute for Materials Physics (NIMP)

⁹Institute of Physics, National Academy of Sciences of Azerbaijan

Ключевые слова: наноструктурированные кристаллы, нанопористость, гибридные источники, адсорбция.

Проблема возобновляемых источников энергии актуальна в настоящий момент [1, 2].

В аспекте возобновляемой энергетики актуальна разработка устройств, функционирующих на новых физических принципах, в частности, получены обнадеживающие результаты в области адсорбционной электроэнергетики [3, 4]. Ведутся разработки преобразователей, которые путем электростатического захвата заряда микроскопических капель воды [5], электрострикции, вызванной адсорбцией воды [6] и др. доступными способами [7] производят электроэнергию из химической энергии адсорбции воды. Тройное соединение состава $CuInSe_2$ характеризуется высокой эффективностью фотоэлектрической конверсии и перспективно для использования в фотовольтаике в настоящий момент [8].

Представляют интерес материалы, имеющие несколько каналов преобразования, в частности, способные преобразовывать в электрический вид энергию прямых солнечных лучей и энергию адсорбции молекул влаги. Такие системы могут быть получены путем создания наноразмерной пористости [9] в фотоадсорберах, в частности, на основе системы $CuInSe_2$, легированной селенидом марганца $MnSe$ в пропорциях, соответствующих формуле $Xmol\%MnSe-(100-X)mol\%CuInSe_2$, где $X=5,7,10$.

Изучение электрических свойств наноструктурированных кристаллов состава $Xmol\%MnSe-(100-X)mol\%CuInSe_2$ было целью данной работы.

В качестве исследуемых объектов использовались кристаллы двух составов: $10mol\%MnSe-90mol\%CuInSe_2$ и $5mol\%MnSe-95mol\%CuInSe_2$. На которые механическим способом наносились углеродные электроды. Вольтамперограммы (V-I) были получены в режиме линейной развертки на устройстве P-20X ("Elinns") в условиях насыщения влагой 75%, 26% и 35% в атмосфере, контролируемой при помощи солей. Камера для образцов представляла собой закрытый контейнер объемом 350 мл, образец помещался между прижимными контактами эллиптического типа, состоящими из серебра, что исключало окисление контактных площадок.

Установлено, что в образцах, легированных селенидом марганца в соотношении 10 к 90mol%, наблюдался аддитивный вклад обоих воздействий в виде увеличения электропроводности для состава $10mol\%MnSe-90mol\%CuInSe_2$ – с 0,047 См до 0,058. Наоборот, в образце состава $5mol\%MnSe-95mol\%CuInSe_2$ отмечена конкурентная динамика каналов генерации носителей заряда сопровождающаяся увеличением электросопротивления (почти в 5 раз).

Acknowledgments. The study was performed in the scope of the H2020/MSCA/RISE/SSHARE number 871284, the Serbia - JINR cooperation Projects № 373 2023 items 4 and 5, Serbia - JINR cooperation Projects № 178 items 7 and 8, Belarus - JINR cooperation Projects № 308 items 21 and 22., RO-JINR Program No. 366/2021 item 84.

Литература:

1. Любарская М. А. Обзор тенденций инновационного развития технологий возобновляемой энергетики // Российский экономический интернет-журнал. – 2019. – №. 3. – С. 54-54.
2. Чернышев А. С., Мордивинов С. Е. Обзор возобновляемых источников энергии // Юность и знания-гарантия успеха-2019. – 2019. – С. 146-149.
3. S. Doroshkevich, A. I. Lyubchik, A. V. Shilo, T. Yu. Zelenyak, V. A. Glazunovae, V. V. Burhovetskiy, A. V. Saprykina, Kh. T. Holmurodov, I. K. Nosolev, V. S. Doroshkevich, G. K. Volkova, T. E. Konstantinova, V. I. Bodnarchuk, P. P. Gladyshev, V. A. Turchenko, S. A. Sinyakina Chemical-Electric Energy Conversion Effect in Zirconia Nanopowder Systems. Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2017, Vol. 11, No. 3, pp. 523–529. DOI: 10.1134/S1027451017030053
4. S. Doroshkevich, A. I. Lyubchik, A. V. Shilo, T. Yu. Zelenyak, V. A. Glazunovae, V. V. Burhovetskiy, A. V. Saprykina, Kh. T. Holmurodov, I. K. Nosolev, V. S. Doroshkevich, G. K. Volkova, T. E. Konstantinova, V. I. Bodnarchuk, P. P. Gladyshev, V. A. Turchenko, S. A. Sinyakina Chemical-Electric Energy Conversion Effect in Zirconia Nanopowder Systems. Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2017, Vol. 11, No. 3, pp. 523–529. DOI: 10.1134/S1027451017030053
5. N. Miljkovic, D. Preston, R. Enright, and E. Wang. Jumping-droplet electrostatic energy harvesting // APPLIED PHYSICS LETTERS. 2014. V. 105, P.013111.
6. Georgen B., Nienhaus H., Weinberg W. H., Mc Farland E. Chemically induced electronic excitations at metal surfaces // Science. 2001. V.294. P. 2521–2523.
7. Leandra P. Santos, Telma R. D. Ducati, Lia B. S. Balestrin, and Fernando Galembeck* Water with Excess Electric Charge // J. Phys. Chem. C 2011, 115, 11226 –11232. Dx. Doi.org/10.1021/jp202652q.
8. Гременок В.Ф., Тиванов М.С., Залесский В.Б. Солнечные элементы на основе полупроводниковых материалов // АЭЭ. 2009. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/solnechnye-elementy-na-osnove-poluprovodnikovyyh-materialov>.
9. Sh. M. Gasanly , A. A. Abdurragimovb, and U. F. Samedovaa The Electric and Thermoelectric Properties of cuinse2based Chalcopyrite // Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 2012, Vol. 48, No. 5, pp. 439–443, 1068-3755, DOI 10.3103/S106837551205004.

© Диденко Е.А., Doroshkevich A.S., Samedovaa U. F., Kirillov A.K., Vasilenko T.A., Oksengendler B.L., Nikiforova N.N., Balasoui M., Mardare D., Mita C., Stanculescu A. Nicoileta Cornei, 2023.

СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ СЛОЕВ MoO_3 - ИНЖЕКТИРУЮЩИХ КОНТАКТОВ ДЛЯ УСТРОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Дубов Е. А.
Убович М.
Комолов А. С.

Санкт-Петербургский государственный университет,
eugene.dbv@gmail.com

Ключевые слова: оксид молибдена (VI), анод, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, работа выхода.

Оксиды переходных металлов (ОПМ) в последние годы находятся в центре большого внимания ввиду их научного и технологического применения. Оксид молибдена (VI) (MoO_3), среди других оксидов переходных металлов (таких, как V_2O_5 и WO_3) обладает структурными, химическими, электрическими и оптическими свойствами, которые можно использовать в устройствах органической электроники [1]. Для MoO_3 характерен высокий оптический коэффициент пропускания - около 80% в видимой области, что является важным параметром для использования в матрицах на основе органических светодиодов [2]. Природа поверхностей раздела между активной светоизлучающей полимерной средой и металлическим электродом или между полимером и слоем, выступающим в роли анода, имеет первостепенное значение для определения характеристик устройства. Управление этими интерфейсами в конечном итоге может стать одним из наиболее важных определяющих факторов в успехе светоизлучающих устройств [3]. ОПМ часто используются в органических электронных устройствах благодаря своим превосходным характеристикам инжекции дырок, выступая в качестве анода. В устройствах ОПМ участвуют в обмене зарядами между подложкой и адсорбированными органическими молекулами, что определяет высоту потенциального барьера между слоем ОПМ и органическим слоем [4]. Основной целью исследования было установление влияния условий синтеза и воздействия атмосферы на атомный состав, работу выхода (WF) и структуру MoO_3 , сформированного методом магнетронного распыления.

В работе в установке вакуумного напыления для осаждения покрытий методами магнетронного распыления "Kepler 450" синтезированы тонкие плёнки MoO_3 . Образец №1 толщиной 10 нм транспортировался для анализа состава с помощью вакуумной переноски с внутренним давлением 10^{-5} Торр. Образец №2 представляет собой образец №1 после контакта с атмосферой. Образец №3 был получен в условиях, использованных при синтезе образца №1, но толщина слоя MoO_3 составляет порядка 150 нм. Транспортировка образца №3 осуществлялась без средств защиты. Анализ химического состава методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и работы выхода методом ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (УФЭС) проводился с помощью комплексного спектрометра Thermo Fisher Scientific Escalab 250Xi. Контроль кристаллической структуры осуществлялся методом XRD на дифрактометре D8 Discover (Bruker), оснащённым источником с энергией излучения $\text{Cu K}\alpha$ (0.15406 нм).

В ходе работы были синтезированы плёнки MoO_3 толщиной 10 и 150 нм. С помощью метода XRD для образца №3 установлено, что наблюдается только ближний порядок. Посредством метода УФЭС получен спектр валентной зоны и установлена работа выхода. По данным исследований, характерная работа выхода оксида молибдена (ϕ) лежит в диапазоне 6-7 эВ [5]. Значение WF для всех образцов близко к данному диапазону. Влияние атмосферы на образец существенно не сказалось на WF, изменение составило 0,08 эВ. Методом РФЭС определена стехиометрия образцов. Согласно литературным источникам, стехиометрия MoO_3 равна 3 [1]. Наиболее близкое значения имеет образец №3 толщиной 150 нм. Вероятнее всего, это связано с уменьшением влияния дефектов вблизи поверхности, которые играют более значительную роль при толщине 10 нм образца №1. Зависимости между стехиометрией и работой выхода установлено не было. В таблице собраны результаты определения стехиометрии и работы выхода для всех образцов.

Таблица – Сравнение стехиометрии и работы выхода для образцов №1, №2 и №3, полученных методом РФЭС и УФЭС

Образец:	Стехиометрия:	WF, эВ:
№1	2,67	5,94

№2	2,53	5,86
№3	2,92	5,9

Работа проведена с использованием оборудования Научного парка СПбГУ «Физические методы исследования поверхности», «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники».

Литература:

1. C. V. Ramana et al. – Growth and surface characterization of sputter-deposited molybdenum oxide thin films //Applied surface science. – 2007. – Т. 253. – №. 12. – С. 5368-5374.
2. K. H. Krishna et al. – Photo-and Electrochromic Properties of Activated Reactive Evaporated MoO₃ Thin Films Grown on Flexible Substrates //Journal of Nanotechnology. – 2008. – Т. 2008.
3. R. H. Friend et al. Electroluminescence in conjugated polymers //Nature. – 1999. – Т. 397. – №. 6715. – С. 121-128.
4. R. T. White, E. S. Thibau, Z. H. Lu – Interface structure of MoO₃ on organic semiconductors //Scientific reports. – 2016. – Т. 6. – №. 1. – С. 21109.
5. L. F. Cauduro et al. Work function mapping of MoOx thin-films for application in electronic devices //Ultramicroscopy. – 2017. – Т. 183. – С. 99-103.

© Е.А. Дубов, М. Убович, А. С. Комолов, 2023.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАПЕЛЬ И ЖИДКИХ ПЛЕНОК НА ПЛОСКИХ И СФЕРИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

Половинкин М.С.,
Магистрант 2 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный
руководитель:
Волков Н.А., к. ф.-м. н.,
доцент кафедры статистической физики СПбГУ

Татьяненко Д.В., к. ф.-м. н.,
доцент кафедры статистической физики СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
polovms@gmail.com

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование капель флюида, образующихся на плоских поверхностях и сферических частицах. Для исследования были выбраны следующие системы: жидкая плёнка аргона на сферической наноразмерной частице, сидячая капля аргона в присутствии непроницаемой стенки, взаимодействующей с молекулами аргона согласно потенциалу Стила (потенциал «9-3») [1], сидячие капли воды на подложках из графита и кристобалита (SiO_2). Для моделирования сферической частицы и подложек из графита и кристобалита были использованы полноатомные модели. Во всех системах задавались случайные начальные конфигурации молекул флюида, соответствующие пересыщенному пару. В процессе моделирования рассмотренных систем в каноническом статистическом ансамбле наблюдалось образование капель, находящихся в равновесии с паром. Для сидячих капель на плоской поверхности были получены зависимости краевого угла от температуры, от размера капли и от силы взаимодействия молекул флюида с поверхностью (подложкой). Полученная зависимость краевого угла от размера капли позволила оценить линейное натяжение с использованием обобщенного уравнения Юнга [2]. Для молекул аргона, составляющих жидкую пленку на сферической частице, при помощи метода термодинамического интегрирования [3] был рассчитан химический потенциал.

Для проведения моделирования нами был использован программный пакет GROMACS 2022.5 [4]. В качестве модели воды была выбрана полноатомная модель TIP3P [5], модели подложек графита и кристобалита были построены с использованием силового поля INTERFACE FF. Для отделения капель флюида от газовой фазы использовался алгоритм кластеризации DBSCAN (Рис. 1 (а)). Вычисление краевого угла сидячей капли на плоской поверхности проводилось в предположении о том, что форма капли представляет собой усеченную сферу, при этом краевой угол вычислялся путем анализа как мгновенных молекулярных конфигураций, так и трёхмерных профилей плотности. Граница капли на профилях плотности, задающая положение разделяющей поверхности жидкость–пар, выделялась на основе предельного значения плотности жидкой фазы, а также при помощи фильтров Собеля (Рис. 1 (б)), далее проводилась аппроксимация границы капли сферической поверхностью и вычисление краевого угла (Рис. 1 (в)).

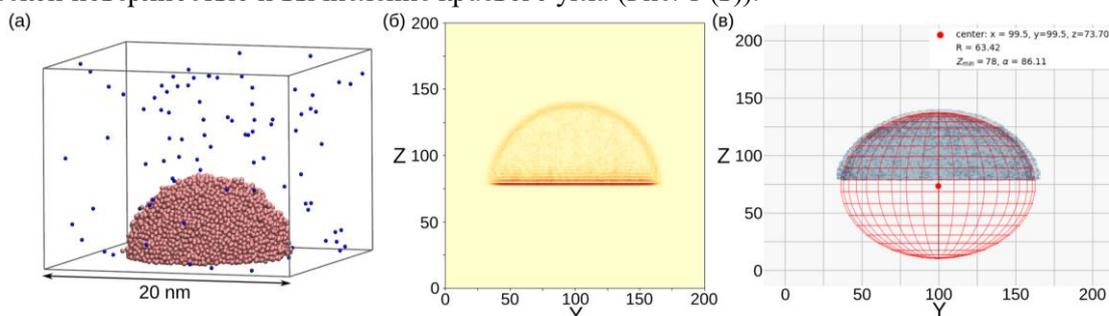


Рис. 1 (а) Сидячая капля аргона на плоской поверхности, находящаяся в равновесии с паром (красным помечены молекулы аргона, составляющие каплю, синим — газовую фазу). (б) Градиенты плотности для сидячей капли, полученные при помощи фильтров Собеля. (в) Аппроксимация разделяющей поверхности сферой.

При увеличении температуры в системах, содержащих сидячие капли на плоских поверхностях, наблюдалось уменьшение краевого угла капли, а также повышение плотности газовой фазы. Увеличение силы взаимодействия подложки с молекулами флюида, составляющими сидячую каплю, приводило к уменьшению краевого угла капли, а также к появлению характерных осцилляций плотности флюида вблизи подложки. Зависимости краевых углов для капель аргона и воды от их размеров свидетельствуют о том, что линейное натяжение в этих двух случаях имеет различный знак.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-13-00151, <https://rscf.ru/project/22-13-00151/>.

Литература:

1. Steele W.A. The physical interaction of gases with crystalline solids // *Surface Science*. 1973. V. 36. No. P. 317–352.
2. Татьянаенко Д.В., Щёкин А.К. Термодинамический анализ вкладов адсорбции и линейного натяжения в краевой угол малых сидячих капель // *Коллоид. журн.* 2019. Т. 81. № 4. С. 517–531.
3. Shirts M.R. et al. Extremely precise free energy calculations of amino acid side chain analogs: Comparison of common molecular mechanics force fields for proteins. *The Journal of Chemical Physics*. 2003. V. 119. No. 11. P. 5740–5761.
4. Berendsen H.J.C. et al. GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation // *Computer Physics Communications*. 1995. V. 91. P. 43–56.
5. Jorgensen W.L. et al. Comparison of simple potential functions for simulating liquid water // *The Journal of Chemical Physics*. 1983. V. 79. No. 2. P. 926–935.

OBSERVATION OF GIANT RASHBA SPIN-ORBIT SPLITTING IN PT-INTERCALATED GRAPHENE ON SiC

Ye Xin^{1,2}, A. A. Rybkina¹, A. A. Gogina¹,
A. V. Tarasov¹, K. A. Bokai¹,
C. Yuan², Z. Zhou², A. M. Shikin¹, A. G. Rybkin¹

*Saint Petersburg State University
Harbin Institute of Technology
st114232@student.spbu.ru*

Intercalation of noble metals can produce giant Rashba-type spin-orbit splittings in graphene. The spin-orbit splitting more than 100 meV has not yet been achieved in graphene on a metallic or a semiconductor substrate.

Here, we report the results of giant Rashba effect on the p-type graphene obtained by Pt intercalation of zero-layer graphene on SiC substrate [1]. Experimentally, we synthesize graphene system on SiC substrate with intercalated Pt submonolayer to evaluate the influence of corrugation at nanoscale on induced spin-orbit coupling in graphene. For this purpose, intercalation of Pt atoms underneath ZLG was carried out. In contrast to the intercalation of 0.5 ML Au [2], a single ordered phase of graphene on Pt was achieved with a low atomic density in Pt monolayer. The giant spin splitting of ~200 meV was observed at a wide range of binding energies. Moreover, theoretical model with additional platinum atoms under graphene shows a decrease in the distance between graphene and Pt layer atoms as a result of the pinning effect and the corrugation of graphene at the sites of point defects.

Comparing the results of theoretical studies of different models with the experimental ones measured by spin-ARPES, XPS and STM methods, we came to the conclusion that inducing giant spin-orbit splitting requires not only a fairly close arrangement of graphene to Pt layer, but also the presence of graphene corrugation caused by non-flat Pt layer. This makes it possible to find a compromise between strong hybridization and increased spin-orbit interaction.

This research was supported by SPbU Laboratory of Electronic and Spin Structure of Nanosystems (Pure ID: 94031444)

References:

1. Rybkina A.A., Gogina A.A., Tarasov A.V., Xin Y., Voroshnin V.Y., Pudikov D.A., Klimovskikh I.I., Petukhov A.E., Bokai K.A., Yuan C., Zhou Z., Shikin A.M., Rybkin A.G. Origin of Giant Rashba Effect in Graphene on Pt/SiC // Preprints. 2023. 2023101115. <https://doi.org/10.20944/preprints202310.1115.v1>
2. Krivenkov M., Golias E., Marchenko D., Sánchez-Barriga J., Bihlmayer G., Rader O., Varykhalov A. Nanostructural origin of giant Rashba effect in intercalated graphene // *2D Materials*. 2017. V. 4. N. 3. P. 035010. doi:10.1088/2053-1583/aa7ad8.

Устные доклады

Секция 4. Физика мягких материалов.

ПРИМЕНЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КОМПАКТНЫХ СТРУКТУР, СОДЕРЖАЩИХ ДНК И НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛОВ

Артамонова Д. А.,
Магистрант 1 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный руководитель:
Касьяненко Н. А., д. ф.-м. н.,
профессор, кафедра Молекулярной биофизики и физики полимеров, СПбГУ

Санкт-Петербургский Государственный Университет
st077204@student.spbu.ru

Ключевые слова: ДНК, наночастицы серебра, ДНК-полимерные частицы с включением красителя и наночастиц металла.

Новым подходом при использовании невирусных генных векторов является создание многокомпонентных систем, сформированных при компактизации ДНК с введением наночастиц металлов, которые, обладают каталитическими и терапевтическими свойствами, и других биологически активных добавок. Такие системы необходимы для использования в таких новых направлениях медицины, как тераностика – комбинации диагностики и терапии. Их можно использовать при создании антибактериальных и противораковых лекарственных форм нового поколения, так называемых «умных лекарств» [1]. Чтобы такие многокомпонентные частицы преодолели биологические барьеры, необходима компактизация ДНК. Для этого формируют ДНК-полимерные интерполиэлектролитные комплексы. Включение в компактные частицы ДНК-полимер наночастиц благородных металлов может расширить область применения таких структур в медицине. Они обладают оптическими свойствами, идеально подходящими для биосенсорных и биовизуальных приложений [2].

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

Для включения наночастиц металлов в формируемые структуры осуществляли восстановление золота и серебра после связывания их ионов с ДНК в растворе. Это обеспечивало сопряжение наночастиц металлов с ДНК и при формировании компактных структур после связывания ДНК-полимер приводило к включению наночастиц металлов в наноразмерные частицы, способные проникать через мембраны клеток.

Восстановление золота непосредственно на ДНК контролировали с помощью спектрофотометрии (спектрофотометр СФ-2000, Россия). Показано, что полоса поглощения ДНК, отражающая состояние вторичной структуры макромолекулы, остается неизменной. Опыт показал, что флуоресцентный краситель бромистый этидий обладает свойством самостоятельно восстанавливать ионы золота на ДНК. Пик плазмонного резонанса золотых наночастиц ярче при связывании ионов золота с ДНК с последующим добавлением красителя.

Для компактизации ДНК использовали сополимер МАГ-ДМАЭМ с включенными наночастицами серебра, синтезированный в ИВС РАН по методике, описанной в работе [3]. Отношение мономерных звеньев полимера к количеству молекул AgNO_3 при восстановлении серебра равно 9.

В работе на основании результатов вискозиметрии (использовали низкоградиентный ротационный вискозиметр типа Зимма-Крозерса) показано, что сопряженные с сополимером наночастицы серебра не мешают компактизации ДНК в растворах малой ионной силы.

Исследование флуоресценции красителя (с помощью спектрофлуориметра Hitachi F-7100) в формируемых структурах показало, что порядок добавления красителя и компактизирующего агента с включенными наночастицами серебра в раствор ДНК влияет на эффект усиления люминесценции EtBr. Предварительная компактизация макромолекулы затрудняет доступ молекулам красителя к местам связывания с ДНК, а в случае связывания красителя с ДНК до компактизации зарегистрирован рост интенсивности люминесценции бромистого этидия при соотношении концентрации мономерных звеньев полимера к фосфатным группам ДНК $N/P < 1$.

Компактизации ДНК используемым сополимером не мешает и предварительное восстановление наночастиц золота непосредственно на ДНК. Это показывает изучение вязкости таких растворов. В работе были сформированы системы (ДНК-полимерные комплексы), содержащие наночастицы двух металлов - золота, связанного с ДНК и серебра, связанного с сополимером. В спектрах фиксируются их пики плазмонного резонанса.

Использование метода динамического рассеяния света (установка Photocor Complex с программным обеспечением DynaLS, Россия) позволяет оценить размеры формируемых частиц. Показано, что полученные компактные структуры имеют дискретный размер порядка 180-200 нм в диаметре, что позволит им проникать через клеточные мембраны.

Литература:

1. Vigderman L., Zubarev E. R. Therapeutic platforms based on gold nanoparticles and their covalent conjugates with drug molecules // *Advanced drug delivery reviews*. – 2013. – Т. 65. – №. 5. – С. 663-676.
2. Fritzsche W., Taton T. A. Metal nanoparticles as labels for heterogeneous, chip-based DNA detection // *Nanotechnology*. – 2003. – Т. 14. – №. 12. – С. R63.
3. Shvedchenko D. O. et al. Mechanism of formation of silver nanoparticles in MAG-DMAEMA copolymer aqueous solutions // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2015. – Т. 17. – С. 1-13.

© Д.А. Артамонова, Н.А. Касьяненко, 2023

ОПТИМИЗАЦИЯ МОДЕЛИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ РЕАКЦИИ КНЕВЕНАГЕЛЯ В СРЕДЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КОАЦЕРВАТОВ

Ермолин Д.В.

Магистрант 1 года обучения
НОЦ Инфохимии ИТМО

Научные руководители:

Муравьев А.А., к.х.н.
доцент НОЦ инфохимии
Новиков А.С., к.х.н.

НИУ ИТМО

ermolin@infochemistry.ru

В современной химии и физике материалов активно развивается направление, связанное с изучением свойств и возможностей полиэлектролитных коацерватов. В частности, полиэлектролитные коацерваты являются перспективной средой для проведения органических реакций. Однако, моделирование таких систем сопряжено с рядом сложностей из-за особенностей структуры и динамики, а также из-за необходимости точно учитывать взаимодействия между полимерами и реагентами. В данной работе, с использованием метода теории функционала плотности (DFT), предпринимается оптимизация подходов к моделированию реакций в полиэлектролитных коацерватах и исследуется влияние этих коацерватов на термодинамику реакции Кнёвенагеля между барбитуровой кислотой и нитробензальдегидами.

В качестве полиэлектролитов были взяты полиакриловая кислота (PAA) и полидиаллилдиметиламмонийхлорид (PDADMAC). Продукты реакции были выделены и охарактеризованы с помощью ЯМР спектроскопии. Анализ спектров выделенных соединений подтвердил, что спектры полностью соответствуют продуктам реакции конденсации. Для моделирования реакции вначале был произведен расчет в газовой фазе с использованием функционала B3LYP и базисного набора def2-SVP (Orca 5.0.4). Все расчеты были выполнены с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт». В качестве полиэлектролитов использовались мономерные звенья PAA и PDADMAC, которые были оптимизированы и пространственно-ориентированы вокруг молекул, участвующих в реакции (рисунок 1).

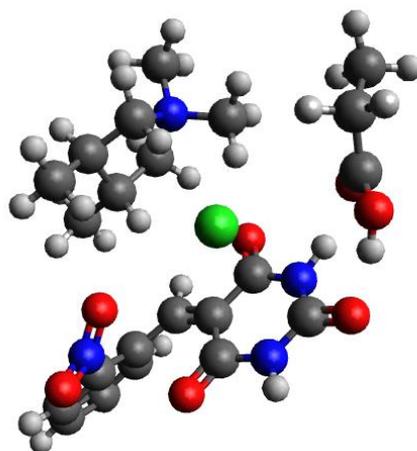


Рисунок 1. Продукт реакции конденсации
в окружении полиэлектролитов

В ходе моделирования особое внимание было уделено анализу влияния ориентации полиэлектролитов вокруг участников реакции. В эксперименте были рассмотрены два основных сценария: добавление полиэлектролитов (PE) к барбитуровой кислоте (BA) и к нитробензальдегиду (NBA). Для каждого случая были проведены отдельные расчеты с целью определения вклада полиэлектролитов в энергетические характеристики реакции. Интересно отметить, что добавление

полиэлектролитов к ВА не приводило к значительным изменениям в энергии Гиббса реакции (таблица 1).

Таблица 1. Влияние положения полиэлектролитов на изменение энергии Гиббса (ΔG) в реакции Кнёвенагеля

Реакция	ΔG , ккал/моль
ВА (PE) + 2-NBA	2,99
ВА + 2-NBA (PE)	-21,76
ВА (PE) + 3-NBA	13,87
ВА + 3-NBA (PE)	-8,97

В ходе первоначальных расчетов в газовой фазе было выявлено, что добавление полиэлектролитов (PE) к реагентам способствует уменьшению энергии Гиббса реакции. Затем модель была усложнена путем добавления учета растворителя – воды. Использовались два различных подхода: CPCM (Conductor-like Polarizable Continuum Model) и SMD (Solvation Model based on Density). При использовании модели SMD результаты не показали ожидаемой надежности, в то время как применение модели CPCM подтвердило тенденцию к снижению энергии Гиббса реакции, выявленную в расчетах в газовой фазе (таблица 2).

Таблица 2. Термодинамические характеристики реакции Кнёвенагеля с и без учета полиэлектролитов в моделях CPCM и SMD

Реакция	ΔG без PE (CPCM), ккал/моль	ΔG с PE (CPCM), ккал/моль	$\Delta\Delta G$ (CPCM), ккал/моль
ВА + 2-NBA	2,96	-21,76	-24,72
ВА + 3-NBA	4,76	-8,97	-13,73
Реакция	ΔG без PE (SMD), ккал/моль	ΔG с PE (SMD), ккал/моль	$\Delta\Delta G$ (SMD), ккал/моль
ВА + 2-NBA	2,14	2,61	+0,47
ВА + 3-NBA	2,14	19,43	+17,29

В ходе проведенного исследования были выявлены ключевые аспекты, влияющие на термодинамические характеристики реакции Кнёвенагеля в полиэлектролитных коацерватах. Особое внимание было уделено влиянию ориентации полиэлектролитов и выбору модели учета растворителя в квантово-химических расчетах. Наиболее точные результаты были получены при использовании модели CPCM с полиэлектролитами, окружающими нитробензальдегид (NBA).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДНК С КАТЕХИНОМ В ПРИСУТСТВИИ ТРЁХВАЛЕНТНОГО ЖЕЛЕЗА

Никитин Д. А., Касьяненко Н. А

Санкт-Петербургский государственный университет
St075754@student.spbu.ru

Ключевые слова: (+)-катехин, ДНК, ионы железа (III), комплексы ДНК-катехин-ионы железа

Обладающие высокой биологической активностью растительные полифенолы в последнее время вызывают большой интерес в качестве компонентов медицинских препаратов. Особое место среди них занимают катехины, содержащиеся в чае, вине, фруктах, как наиболее перспективные противоопухолевые агенты [1]. Например, как было установлено, эпигаллокатехин галлат в ряде случаев показывал противоопухолевую активность. Препараты на основе катехинов должны обладать высокой биосовместимостью и низкой токсичностью. В данный момент ведутся исследования, направленные на использование катехинов в многокомпонентных структурах с целью усиления их биологической активности. Было показано, что катехины способны проявлять более существенную биологическую активность в присутствии трёхвалентного железа [2]. Настоящее исследование направлено на изучение взаимодействия ионов железа (III) с (+)-катехином в растворе, а также рассматривает возможность формирования комплексов ДНК с ионами железа и катехинами одновременно, так как ДНК остается основной мишенью для действия противоопухолевых препаратов.

Для исследования взаимодействия ионов трёхвалентного железа с катехинами были использованы методы спектрофотометрии, динамического рассеяния света и атомной силовой микроскопии. Спектры поглощения катехина в растворах, содержащих различные концентрации железа, не изменялись, поэтому можно сказать, что при их возможном взаимодействии π -электронная структура катехинов не затрагивается. Однако взаимодействие происходит: исследование тех же растворов методом динамического светорассеяния показало наличие в нём двух типов дискретных наночастиц с гидродинамическими радиусами (40 ± 10) нм и (200 ± 50) нм. Метод атомной силовой микроскопии подтвердил существование данных наночастиц. Это демонстрирует формирование комплексов катехина с ионами железа в растворе (использовали соль FeCl_3 и катехин фирмы Sigma Aldrich). При этом формируемые ассоциаты отличаются устойчивостью, о чем свидетельствует распределение по размерам и вид частиц на поверхности свежесколотой слюды при их исследовании с помощью атомной силовой микроскопии.

В условиях эксперимента катехин не показал взаимодействия с ДНК: ни спектральные, ни гидродинамические характеристики макромолекулы не изменялись в присутствии различных концентраций катехина. Исследования проводили в растворах, содержащих 0,005 М NaCl. Использовали коммерческий образец высокомолекулярной ДНК тимуса теленка (Sigma Aldrich). Между тем, связывание ДНК с ионами железа в этих условиях наблюдали однозначно: добавление ионов железа в раствор ДНК приводит к уменьшению объема молекулярного клубка, а при определённых концентрациях ионов железа в растворах ДНК макромолекула претерпевает конденсацию (которая сопровождается резким значительным падением вязкости раствора) с последующим выпадением в осадок при $C(\text{Fe}^{3+}) > 4 \times 10^{-3}$ М. В основе этого взаимодействия лежит электростатическое притяжение ионов железа к отрицательно заряженным фосфатным группам ДНК.

Свойства трёхкомпонентных растворов (ДНК-железо-катехин) несколько варьировались в зависимости от порядка смешивания компонентов. Несмотря на это, данные, полученные разными методами, указывают на формирование комплексов, в которых ДНК контактировала с ионами железа и катехином.

Так, в результате использования методов низкоградиентной вискозиметрии и динамического рассеяния света было выявлено падение размеров клубка ДНК в присутствии ионов железа, что вызвано изменением полиэлектролитного набухания ДНК. В тройных системах размеры ДНК отличались и от наблюдаемых при её комплексообразовании с ионами железа без катехина, и от размеров свободной ДНК, что указывает на формирование комплексов ДНК-катехин-железо.

Таким образом, было показано, что молекула ДНК не вступает во взаимодействие с молекулами катехина в растворе, однако она способна образовывать комплексы с катехином в присутствии ионов трёхвалентного железа.

Литература:

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. 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.

© Д.А. Никитин, Н.А. Касьяненко, 2023

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ КУБ-ЛАБОРАТОРИЯ ПО КУЛЬТИВИРОВАНИЮ КЛЕТОК

Семенов А.В.,¹ Гончаров В.В.,¹
Петрова М.С.,¹ Домарева Н.П.,¹

1 - Магистрант 2 года обучения
Мегафакультет Наука о Жизни, «НИУ» ИТМО

Научный руководитель:
Мешков А.В., к.т.н.,
Инженер, Мегафакультет Наука о Жизни, «НИУ» ИТМО

НИУ «ИТМО»
19.sasha.2000@gmail.com

Разработка процесса культивирования клеток и последующее тестирование успешных кандидатов привели к проведению большого количества исследовательских культиваций, что способствует научному прогрессу и появлению автоматизированных молекулярно-биологических лабораторий, оснащенных технологическими манипуляторами. Автоматизированная Куб-лаборатория по культивации клеток предоставляет инновационный метод оптимизации клеточных реакций через управление структурой материалов, что открывает новые перспективы для регенеративной медицины и реализации новых решений.



Рис. 1. (а) Робот-манипулятор Rozum (б) Куб-лаборатория

Культивация клеток представляет собой процесс выращивания клеток в контролируемых условиях, где необходимо строго соблюдать условия, такие как стерильность, чистота воздуха и определенная температура. Для обеспечения этих условий используется сборно-разборная лаборатория в форме куба, оборудованная НЕРА-фильтрами, бактерицидными лампами, термостатами и другими инструментами, включая ламинарный бокс для работы с биологическими объектами в стерильных условиях, сушильную печь для обеззараживания посуды, термостат для регулирования и поддержания температуры, CO₂-инкубатор, микроскоп для наблюдения за ростом клеток и холодильник для хранения реагентов.

В данной лаборатории был установлен коллаборативный робот-манипулятор Rozum PULSE 90. Данный манипулятор обладает модульной конструкцией и шестью степенями свободы и может управляться как через встроенный интерфейс, так и через программный код, написанный на Python 3. Из основных преимуществ, данный манипулятор имеет повторяемость движений с точностью 0.1 мм, а также максимальную полезную нагрузку в 4 кг.

На данный момент удалось наладить взаимодействие манипулятора с сушильной печью, обеспечить контроль над роботом, выполнить базовые химические операции и спроектировать захватный механизм.

ОЦЕНКА ПОЛЯРНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ МИЦЕЛЛ ИЗ СПЕКТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Солунина А.А.,
Магистрант 1 года обучения
Института Химии СПбГУ

Научный руководитель:
Фетин П.А., к.х.н.
Доцент, кафедра химии ВМС, Институт Химии СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
st076490@student.spbu.ru

В последние годы низкомолекулярные поверхностно-активные вещества (ПАВ) активно исследуются в качестве мицеллярных катализаторов. Разработки в данной области показали свою эффективность и уже используются для промышленных целей [1]. Полимерные ПАВ в качестве мицеллярных катализаторов исследованы в гораздо меньшей степени, хотя имеют ряд перспективных для мицеллярного катализа свойств: крайне низкие величины ККМ и большие солюбилизационные ёмкости. Также полимерные ПАВ сравнительно легко можно очистить диализом от продуктов реакции и использовать вновь. Достижения полимерной химии могут позволить, меняя химическую структуру полимера, широко варьировать характеристики образуемых мицелл, что позволит упростить создание подходящего катализатора под заданный механизм реакции. А регенерируемость таких катализаторов при помощи диализа делает их перспективными для возможного использования и в промышленных масштабах. Таким образом, полимерные мицеллообразующие вещества являются перспективными конкурентами низкомолекулярных поверхностно-активных веществ и требуют более детального изучения.

Для подбора оптимального катализатора данного типа необходимо иметь возможность определять характеристики среды, формируемой как внутри мицелл, так и на границе раздела псевдофаз с растворителем. Однако на данный момент определение таких характеристик (в частности, полярности) экспериментально затруднено [2].

Данная работа посвящена разработке метода экспериментального определения полярности среды в ядрах мицелл путём анализа спектров люминесценции зондов – полициклических ароматических молекул, соотношение интенсивностей пиков на спектрах которых чувствительно к изменениям характеристик их микроокружения [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 21-73-10132. Авторы выражают благодарность ресурсным центрам СПбГУ: центру «Магнитно-резонансные методы исследования вещества» и «Методы анализа состава вещества», а также криогенному отделу.

Литература:

1. Lipshutz V.H. et al., *Org. Lett.*, 2008, vol. 10, no. 7, pp. 1325– 1328.
2. Z. H. T. S.A. Bernhard, B.F. Lee, *Mol. Biol.*, vol. 18, p. 405, 1966.
3. D. C. Dong and M. A. Winnik, *Can. J. Chem.*, vol. 62, no. 11, pp. 2560–2565, 1984, doi: 10.1139/v84-437.

© А.А. Солунина, П.А. Фетин, 2023

АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ ДНК С КООРДИНАЦИОННЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ МЕТАЛЛОВ, СОДЕРЖАЩИМИ ФЕНАНТРОЛИНОВЫЕ ЛИГАНДЫ

Шатица М.П.,
Магистрант второго года обучения
Кафедра молекулярной биофизики и физики полимеров

Научный руководитель:
Касьяненко Н.А.,
Доктор физико-математических наук, профессор
Кафедра молекулярной биофизики и физики полимеров

Демидов В.Н.,
Доктор химических наук
Институт химии силикатов РАН

Санкт-Петербургский государственный университет
st067901@student.spbu.ru

DNA binding, 1,10-Phenanthroline, Copper(II), Manganese(II)

В современной медицине для борьбы с онкологическими заболеваниями широко применяется координационное соединение платины – цисплатин и его производные, карбоплатин и оксалиплатин. Основной молекулярной мишенью препаратов на основе платины является молекула ДНК: взаимодействуя с ее азотистыми основаниями, цисплатин способствует формированию внутри- и межнитевых сшивок, блокирующих синтез ДНК и деление раковых клеток [1]. Недостаток существующих препаратов платины заключается в побочных эффектах, которые включают в себя высокую гепато- и нефротоксичность, а также неизбирательность действия, что в совокупности с развитием резистентных к цисплатину опухолей приводит к необходимости поиска более эффективных и безопасных аналогов цисплатина.

Для минимизации побочных эффектов при разработке новых противоопухолевых препаратов используются компоненты, обладающие высокой биосовместимостью. Медь и марганец, в отличие от платины, относятся к числу эндогенных металлов. Медь выступает в качестве кофактора в некоторых ферментах, отвечающих за свертывание крови и препятствующих развитию окислительного стресса; металлопротеины марганца регулируют функционирование иммунной системы и уровень сахара в крови, играют важную роль в поддержании функций мозга и др. [2,3].

Общеизвестно, что координация иона токсичного металла с активной органической частью приводит к синергетическому эффекту. Фенантролин и его производные представляют интерес не только с точки зрения их потенциальной противоопухолевой активности. Они также обладают эффективными противовирусными, антибактериальными и противогрибковыми свойствами [4].

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 ходе исследований использовали высокомолекулярную ДНК тимуса теленка (коммерческий препарат компании Sigma Aldrich). Молекулярная масса образцов ДНК определялась вискозиметрически по значению характеристической вязкости ДНК в 0.15 М NaCl. Изучение комплексообразования проводилось в водном растворе с добавлением низкомолекулярной соли - 0.005 М NaCl. Были получены данные с использованием следующих экспериментальных методов: спектрофотометрия, низкоградиентная вискозиметрия, динамическое светорассеяние и двойное лучепреломление в потоке, проведено изучение плавления ДНК и спектрофотометрическое титрование. Также было проанализировано влияние ионной силы раствора на комплексообразование.

Для спектров УФ поглощения соединений характерно наличие двух хорошо разрешенных полос, которые при этом пересекаются со спектральной областью поглощения ДНК. В работе

предложен способ анализа спектральных характеристик таких систем. Результаты спектрофотометрических исследований показывают, что при взаимодействии соединений марганца с ДНК фенантролин остается в координационной сфере марганца. При связывании фенантролиновые лиганды находятся в контакте с атомными группами ДНК. В работе проведена оценка констант связывания соединений с ДНК.

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 наноэлектроники СПбГУ.

Литература:

1. Rajapakse R. M. G., Dunuweera S. P. Discovery, chemistry, anticancer action and targeting of cisplatin //Int. J. Clin. Oncol. Cancer Res. – 2017. – Т. 2. – №. 3. – С. 65-74.
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.
4. Horning K. J. et al. Manganese is essential for neuronal health //Annual review of nutrition. – 2015. – Т. 35. – С. 71-108.
5. 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.

CONTROLLING THE DYNAMIC BEHAVIOR OF LOCALIZED STRUCTURES IN LIGHT-RESPONSIVE CHIRAL NEMATIC LIQUID CRYSTALS

Пивень А.О.,

Аспирант 1 года обучения
научно-образовательного центра
инфохимии, университет ИТМО

Научный руководитель: Орлова Т., к.ф.-м.н.,
ведущий научный сотрудник
научно-образовательного центра
инфохимии, университет ИТМО

*Национальный исследовательский университет ИТМО
anastasiaapiven@gmail.com*

In liquid crystals, various supramolecular chiral localized topologically complex structures, ranging in size from tens of microns, can be observed [1-3]. Previous studies have investigated the generation of diverse static topological structures through optically induced local reorientation of liquid crystal molecules in light-responsive chiral nematics using focused Gaussian light beams [4]. A new method, based on light-induced control of the cholesteric helix pitch, allows for the creation of various supramolecular static and unique revolving patterns using a focused ultraviolet Gaussian beam with only tens of nanowatts of power [5].

The work performed by these dynamic structures can be transformed into the orbital transport of nano- or colloidal particles. In previous research [5], these revolving structures with sizes of up to 50 microns and a rotation period of approximately 360 seconds were studied. The goal of this study is to create dynamic localized supramolecular structures in frustrated thin films of light-responsive chiral nematic liquid crystal through light-induced photochemical transformations of the chiral dopant molecules and to determine the optimal characteristics of the recording Gaussian light beam for controlling the dynamic behavior of these structures when they exceed 50 microns in size.

Авторы благодарят профессора Etienne Brasselet (University of Bordeaux, France) за предоставленные жидкокристаллические образцы. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации в рамках программы ИТМО Fellowship and Professorship Program.

Литература:

1. Hess A. J., Poy G., Tai J. B., Žumer S., Smalyukh I. I. Control of Light by Topological Solitons in Soft Chiral Birefringent Media // *Physical Review X*. 2020. № 10. P 031042.
2. Yang B., Brasselet E. Arbitrary vortex arrays realized from optical winding of frustrated chiral liquid crystals // *Journal of Optics*. 2013. № 15. P 044021.
3. Ackerman P. J., Qi Z., Smalyukh I. I. Optical generation of crystalline, quasicrystalline, and arbitrary arrays of torons in confined cholesteric liquid crystals for patterning of optical vortices in laser beams // *Physical Review E*. 2012. № 86. P 021703.
4. Smalyukh I. I., Lansac Y., Clark N. A., Trivedi R. P. Three-dimensional structure and multistable optical switching of triple-twisted particle-like excitations in anisotropic fluids // *Nature Materials*. 2010. № 9.
5. Orlova T., Lancia F., Lossert C., Lamsaard S., Katsonis N., Brasselet E. Revolving supramolecular chiral structures powered by light in nanomotor-doped liquid crystals // *Nature Nanotechnology*. 2018. № 13.

Устные доклады
Секция 5. Радио- и электрофизика.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА ЛИТИЙ-ИОННОГО АККУМУЛЯТОРА С ЗАЩИТНЫМ СЛОЕМ ПРИ КОРОТКОМ ЗАМЫКАНИИ

Журавлев Д. В.,
Магистрант 1 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный
руководитель: Васильков С. А.,
к. ф.-м. н., старший преподаватель

*Санкт-Петербургский государственный университет
st076115@student.spbu.ru*

Литий-ионные батареи получили широкое распространение в качестве источника энергии в самых различных электротехнических устройствах. Однако современные аккумуляторы имеют ряд недостатков, например, возможность внутреннего короткого замыкания. Оно легко может привести к воспламенению всего аккумуляторного блока и взрыву.

Одним из возможных решений, которое способно предотвратить возгорание батареи, является модификация внутренней структуры литий-ионной ячейки. В настоящее время ведутся исследования по применению защитного полимерного слоя, располагаемого между электродом батареи и токосъемником [1]. В номинальном режиме работы аккумулятора защитный слой обладает высокой проводимостью и не препятствует протеканию тока. Но при перезарядке аккумулятора или его перегреве сопротивление слоя резко возрастает, что ограничивает ток и позволяет избежать воспламенения аккумулятора.

В данной работе было произведено численное моделирование разрядки и нагрева проткнутой гвоздем литий-ионной батареи с защитным слоем и без него. Полная совместная задача о моделировании токопрохождения, химических реакций и теплопереноса является крайне ресурсоемкой, поэтому модель была разделена на электрохимическую и тепловую компоненты.

Электрохимическая часть представляет одну (из множества) литий-ионную ячейку с описанием ее внутренней структуры и соответствующую часть гвоздя. Описание физических и химических процессов, происходящих в ячейке аккумулятора, основано на теории пористого электрода [2, 3]. На основе этой компоненты определяется выделяемая тепловая мощность, которая передается в тепловую модель. Здесь рассчитывается распределение тепла во всем аккумуляторе с гвоздем. Учитывается теплоотвод за счет конвекции, излучения и теплопередачи через стол, на котором лежит батарея.

В результате было показано, что при отсутствии защитного слоя аккумулятор полностью разряжается за 6 минут, нагреваясь при этом более, чем до 600 °С. Такой нагрев неизбежно приведет к возгоранию. Наличие защитного слоя значительно ограничивает ток, и полная разрядка аккумулятора занимает примерно 70 минут. Температура достигает 153 °С и начинает снижаться в конце разрядки. Таким образом, данная численная модель показывает, как наличие защитного полимерного слоя способно ограничить рост температуры при коротком замыкании литий-ионного аккумулятора.

Литература:

1. Beletskii E.V., Alekseeva E.V., Anishchenko D.V., Levin O.V. Li-Ion Battery Short-Circuit Protection by Voltage-Driven Switchable Resistance Polymer Layer // *Batteries* 2022, V. 8(10), P. 171.
2. Doyle M., Fuller T.F., Newman J. Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge // *J. Electrochem. Soc.* 1993. V. 140, N 6. P. 1526–1533.
3. Gu W.B., Wang C.Y. Thermal-Electrochemical Modeling of Battery Systems // *J. Electrochem. Soc.* 2000. V. 147, N 8. P. 2910-2922.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОКОАЛЕСЦЕНЦИИ РАЗНОИМЕННО ЗАРЯЖЕННЫХ КАПЕЛЬ ВОДЫ, ВЗВЕШЕННЫХ В СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ

Карчевская А.С., Чирков В.А., Елагин И.А.

Санкт-Петербургский государственный университет
st069585@student.spbu.ru

Ключевые слова: численное моделирование, двухфазная жидкость, коалесценция, противоположно заряженные капли

Процесс электрокоалесценции привлек к себе внимание благодаря своей важности в различных областях, в частности, как один из наиболее эффективных способов очистки нефти от микрокапель воды. Для проектирования электродегидраторов и определения наиболее эффективных режимов его работы важно понимать, каким образом происходит объединение капель и какие параметры могут повлиять на процесс очистки.

В данной работе изучается влияние заряда на двух проводящих каплях, взвешенных в слабопроводящей жидкости при постоянном напряжении, на их коалесценцию. Цель данного исследования — обеспечить понимание того, как наличие ненулевого заряда на каплях влияет на электрокоалесценцию, включая процессы сближения капель, их объединения и распыления, а также определить диапазон возможных (реалистичных) значений заряда капель, которые могут возникнуть в процессе электростатической очистки. Предполагается, что капли сохраняют свой заряд во время движения (т.е. не учитывается диссипация заряда из-за конечной электрической проводимости масла). Как наиболее вероятный в данной работе был рассмотрен процесс взаимодействия именно разноименно заряженных капель.

Для достижения поставленной цели исследование проводилось с помощью численного конечно-элементного моделирования в COMSOL Multiphysics. Математическая модель, которая ранее была проверена экспериментально в случае незаряженных капель, использует для описания двухфазных сред произвольный лагранжево-эйлеров метод. Этот метод не имеет диффузионной границы раздела, поэтому он может точно описывать изменения свойств жидкости на этой границе. В модели решаются уравнения Навье–Стокса для несжимаемой среды и электростатические уравнения [1, 2].

Для того, чтобы численно оценить диапазон зарядов, которые могут возникнуть на поверхности капли, были рассмотрены три основных случая: распределение зарядов после декоалесценции капель; распределение заряда в результате контакта капель с электродом; заряд капель от неравновесных диссоциационно-рекомбинационных заряженных слоев.

Было установлено, что заряд оказывает существенное влияние на процессы сближения, коалесценции и декоалесценции капель. На рис. 1 приведена карта режимов для капель радиусом 1 мм, заряженных одинаковым по модулю, но разноименным зарядом.

Оказалось, что пороговое значение напряженности поля для перехода от исхода с коалесценцией к исходу с декоалесценцией повышается на более чем 20% при увеличении заряда в рассматриваемом диапазоне зарядов.

Кроме того, для зарядов больших, чем 0,75 нКл, не наблюдается декоалесценции с образованием трех капель: при превышении порогового значения напряженности поля капли при взаимодействии распыляются.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 22-79-10078).

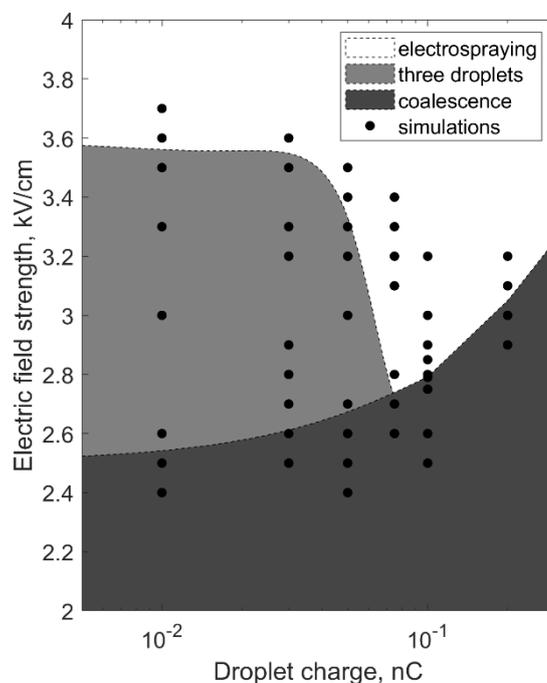


Рисунок 3 Карта режимов для противоположно заряженных капель радиусом 1 мм.

Литература:

1. G. O. Utiugov, V. A. Chirkov, and I. A. Dobrovolskii, "The Experimental Verification of Electrodeformation and Electrocoalescence Numerical Simulation Based on the Arbitrary Lagrangian–Eulerian Method," in 2020 IEEE 3rd International Conference on Dielectrics (ICD), 2020, pp. 529–532.
2. G. Utiugov, V. Chirkov, and M. Reznikova, "Application of the arbitrary Lagrangian-Eulerian method to simulate electrical coalescence and its experimental verification," *Int. J. Plasma Environ. Sci. Technol.*, vol. 15, no. 2, p. e02009, 2021.
3. I. Dobrovolskii and V. Chirkov, "Dissociation-recombination Charging of Conducting Droplet Suspended in a Dielectric Liquid with Unequal Ion Mobilities," 2022 IEEE 21st International Conference on Dielectric Liquids (ICDL), Sevilla, Spain, 2022, pp. 1-4

© А.С. Карчевская, В.А. Чирков, И.А. Елагин, 2023

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА ОКРЕСТНОСТЕЙ КОНТАКТНЫХ ПЯТЕН ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОНТАКТОВ ПРОТЕКАНИЕМ ТОКОВ КОРОТКОГО ЗАМЫКАНИЯ

Колесник Р.В.¹, Павлейно М.А.¹, Сафонов М.С.¹, Хрестин А.В.²

¹Санкт-Петербургский государственный университет,

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Санкт-Петербургский государственный университет
pro_stealth@mail.ru

Ключевые слова: контактная поверхность, ток короткого замыкания

Проектировка любой сложной электротехнической аппаратуры требует серьезного анализа физических процессов, протекающих в них при их работе. Для это в настоящее время все чаще применяется использование численных расчетов исследователями различного уровня [1-4]. Особый интерес в проектировке вызван влиянием токов нагревом систем токами короткого замыкания так как они несут наибольшую опасность при эксплуатации электрического оборудования.

В данной работе проведено численное моделирование нагрева окрестностей контактных пятен медных электрических контактов токами короткого замыкания. В модели решается термо-электромеханическая задача со свойствами материала, зависящими от температуры [1].

Проанализирована связь тепловых и механических полей при нагреве до температур, превышающих температуру рекристаллизации материала. Проанализирована динамика изменения размеров областей упругих и пластических деформаций. Установлено, что процесс размягчения материала вблизи контактного пятна является необратимым и при остывании его размеры не изменяются, а при интенсивном нагреве область максимальной температуры локализована не на краю КП, а смещена к центру.

Показано, что между нагревом края контактной поверхности до температуры рекристаллизации и началом его ускоренного роста имеется задержка во времени. Показано как ее значение зависит от силы контактного нажатия и от динамики нагрева контакта.

Предложены новые подходы к снижению времени, необходимого на расчет модели. Первый заключается в упрощении моделирования большого количества периодов тока: начиная с определенного периода синусоидальный ток заменяется на действующее значение. Второй подход основывается на повторном использовании распределении механических полей для итераций решения, в которые температура края контактного пятна не превышает все максимальные ранее достигнутые значения так как это является причиной неизменности радиуса контактного пятна.

Полученные данные имеют не только теоретическое, но и практическое значение. В частности, они показывают, что подход, описанный в ГОСТ [5], учитывающий исключительно интеграл Джоуля для оценки эквивалентности токов, может приводить к существенной разнице в перегреве контактов.

Литература:

1. А.В. Хрестин, М.А. Павлейно, М.С. Сафонов. «Изменение характеристик контактных пятен при протекании токов», ЖТФ, 93(1), 146 (2023).
2. T. Israel, S. Schlegel, S. Grossmann, T. Kufner, G. Freudiger. IEEE Holm Conf. Electr. Contacts, Albuquerque, NM, 254 (2018).
3. Zhu Tiansheng, Liu Hongwu, Yin Nairui, Guan Ruiliang, Jia Shenli. 2nd International Conference on Electric Power Equipment (Matsue, Japan, 2013)
4. Multiphysics Analysis of Plug-In Connector Under Steady and Short Circuit Conditions Xiangyu Guan, Naiqiu Shu, Bing Kang, and Minghan Zou IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology (Volume: 5 , Issue: 3 , March 2015)
5. ГОСТ Р 52736–2007 Короткие замыкания в электроустановках. Методы расчета электродинамического и термического действия тока короткого замыкания.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОКОАЛЕСЦЕНЦИИ ДВУХ КАПЕЛЬ ВОДЫ РАЗЛИЧАЮЩИХСЯ РАДИУСОВ

Луцек В.,
Бакалавр 4 года обучения

Научный руководитель: Чирков В.А.,
PhD, доцент, кафедры радиопизики, СПбГУ

Санкт-петербургский государственный университет
st088085@student.spbu.ru

Одним из эффективных и распространённых способов разделения эмульсий обратного типа, когда дисперсионная среда является жидким диэлектриком, а дисперсная фаза электропроводящей жидкостью, является электродегидратация. В основе этой технологии лежит воздействие сильных электрических полей на микрокапли проводящей жидкости (например, воды), за счёт чего они начинают двигаться навстречу друг другу и, при определённых условиях, могут объединяться, образуя капли большего размера. Соответствующий процесс называется электрокоалесценцией. Однако по мере увеличения размеров капель может происходить и обратный процесс — декоалесценция, когда они вместо объединения разделяются на несколько более мелких частей или даже распыляются.

Для развития соответствующей технологии и улучшения характеристик электродегидраторов за последние годы широко распространилось применение численного моделирования. Однако в большинстве моделей используется избыточно идеализированная постановка, например, когда контактирующие капли имеют одинаковый размер [1]. Ввиду этого встаёт вопрос о том, как влияет различие радиусов капель на основные характеристики процесса, прежде всего, на порог перехода от коалесценции к декоалесценции и возможные исходы декоалесценции.

Настоящее исследование проведено на основе численного моделирования в двумерной осесимметричной постановке. Для описания двухфазной несмешивающейся жидкости использован произвольный лагранжево-эйлеров метод (также называемый методом подвижной границы). Преимуществом этого метода по сравнению с методами фазовой функции является то, что интерфейс в данном подходе является резким (не размытым), что позволяет задавать ступенчатое изменение свойств при переходе через границу раздела. Однако в этом методе стандартными средствами нельзя описывать изменение топологии, например, в момент касания двух капель, однако это проблема решается ручным перестроением геометрии и продолжением расчёта, что описано в работе [2]. Расчёт электростатических уравнений проводится в приближении идеально проводящих капель, для чего в модели на их поверхности задаются условия эквипотенциальности. Гидродинамика капель описывается на основе уравнений Навье — Стокса для несжимаемой изотермической жидкости.

Расчёты проведены для капель с радиусами от десятых долей до единиц миллиметров. Этот диапазон представляет наибольший интерес, поскольку при меньшем размере капель силы поверхностного натяжения столь велики, что при типовых для электродегидраторов значениях напряжённости электрического поля исходом взаимодействия всегда является коалесценция. А капли большего радиуса эффективно выводятся из эмульсии под действием силы тяжести. Для каждой пары радиусов проводился набор расчётов с последовательным повышением напряжения и фиксировались исходы. Основным охваченный диапазон напряжённостей электрического поля — от 1 до 4 кВ/см. Свойства контактирующих жидкостей выбраны соответствующими паре дистиллированная вода – оливковое масло. Коэффициент межфазного натяжения для этой пары — 16 мН/м.

Для нескольких радиусов одной капли проведено варьирование радиусов второй капли, и полученные результаты сопоставлены с тем, что получается для одинаковых капель. В результате выявлены значительные различия. Во-первых, в момент перед касанием капель одна капля заостряется, а вторая — притупляется, что в литературе иногда называют режимом взаимодействия «конус-лунка». Во-вторых, среди возможных исходов появляется широкая область (по напряжённости электрического поля), когда происходит частичная коалесценция, т.е. часть капли меньшего размера объединяется с большей каплей, а часть отрывается. В случае капель одинакового радиуса такой исход отсутствует. В-третьих, пороговая напряжённость электрического поля

перехода от полной коалесценции к частичной определяется преимущественно размером большей капли, если сравнивать с аналогичной характеристикой для капель одинаковых радиусов.

Работа поддержана РФФ (грант № 22-79-10078).

Литература:

1. Chirkov V.A., Saifullin D.D., Utiugov G.O., and Samusenko A.V., Numerical Simulation of Non-coalescence Regime for Two Conducting Droplets at High Voltage Electrostatic Separation of Water-in-oil Emulsion // 2023 5th International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (REEPE). Mar. 2023. P. 1–5.
2. Utiugov G., Chirkov V., and Reznikova M., Application of the arbitrary Lagrangian-Eulerian method to simulate electrical coalescence and its experimental verification // Int. J. Plasma Environ. Sci. Technol.. 2021. V. 15, N 2. P. e02009.

© В. Луцек, В.А. Чирков, 2023

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРТЫ РЕЖИМОВ ДЕКОАЛЕСЦЕНЦИИ ДВУХ ПРОВОДЯЩИХ КАПЕЛЬ, ВЗВЕШЕННЫХ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ

Сайфуллин Д. Д.,
Чирков В. А.

Санкт-петербургский государственный университет
st068067@student.spbu.ru

Ключевые слова: электрокоалесценция, электораспыление, численное моделирование, двухфазная жидкость, произвольный метода Лагранжа-Эйлера.

Существует ряд двухфазных несмешивающихся жидкостей, которые необходимо разделять на составляющие для дальнейшего использования. Избавление дисперсионной фазы от частиц дисперсной среды называется демульсификацией. Одним из самых эффективных методов является электростатическая демульсификация [1]. Его принцип основан на объединении мелких капель в более крупные за счет приложения сильного электрического поля с помощью специальных промышленных устройств — электростатических дегидраторов. Крупные капли в свою очередь быстрее тонут или всплывают в дисперсионной среде, что способствует разделению.

Чем больше величина электрического поля, тем быстрее капли сближаются и объединяются. Однако всегда существует пороговое значение напряжённости, превысив которое вместо объединения капель — коалесценции — мы получим обратный результат — декоалесценцию — в результате чего мы можем получить разные исходы с разной степенью негативного влияния на процесс очистки.

Цель данной работы — определение всех возможных результатов (и степени их негативного влияния на процесс очистки) взаимодействия пары проводящих капель, взвешенных в масле, под действием высокого напряжения с амплитудой выше порогового значения для широкого диапазона радиусов взаимодействующих капель, получив тем самым «карту режимов» — диаграмму исходов взаимодействия в зависимости от радиуса капель R и средней напряжённости поля E . Данная карта режимов позволит рассмотреть потенциально эффективные диапазоны напряжений, позволяющие оптимизировать процесс электроочистки.

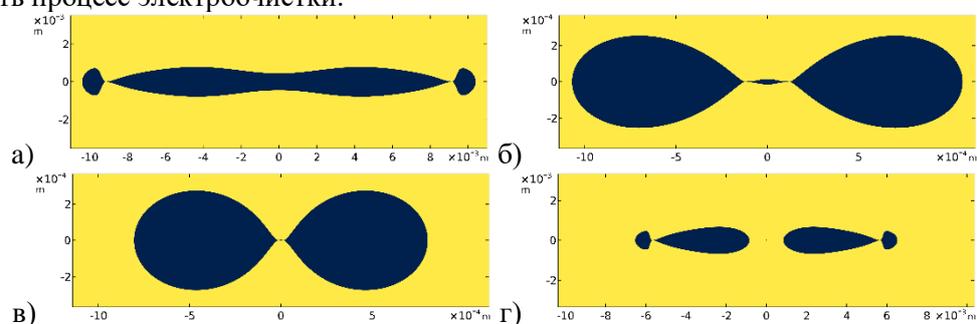


Рисунок 1. Основные варианты исходов декоалесценции

Для достижения поставленных целей использовалось численное моделирование в пакете COMSOL Multiphysics. Для описания динамики процесса параллельно решались уравнение Навье-Стокса, уравнение неразрывности и закон Пуассона для электростатики. При этом для описания распределения двух фаз использовался метод подвижной границы, а в моменты объединения или разделения двух капель решение останавливалось, проводилась ручная модификация (объединение или разделение объёмов капель) и запускался новый шаг решения.

В результате было выявлено несколько возможных исходов, представленных в порядке роста напряжённости поля:

- разделение на три капли. В результате взаимодействия мы получаем две крупные капли и одну намного меньшего размера между ними (рис.1б). Данный исход почти не оказывает негативного эффекта на качество очистки;
- отскок. Капли после столкновения отскакивают друг от друга и не происходит никаких изменений кроме перераспределения заряда между каплями (рис.1в). Данный исход не оказывает негативного эффекта на качество очистки;
- распад. Капли после отскока продолжают разрываться, в результате чего образуются

дополнительные мелкие капли (рис.1г). Данный исход может оказывать заметное негативное влияние на качество очистки.

- электрораспыление. С краёв капель сильно деформированных капель начинают в большом количестве отрываться мелкие капли. Данный исход оказывает крайне негативное влияние на качество очистки и вызывает риск короткого замыкания.

Электрораспыление может наблюдаться также в узком диапазоне напряженности вблизи порога «коалесценция-декоалесценция» (рис.1а), а при переходе «отскок-multidrops» — после отскока капель, распыление мелких капель с краев происходит в направлении друг друга.

При помощи расчётов в широком диапазоне радиусов капель были получены данные, достаточные для формирования полноценной карты режимов, представленной на рисунке 2:

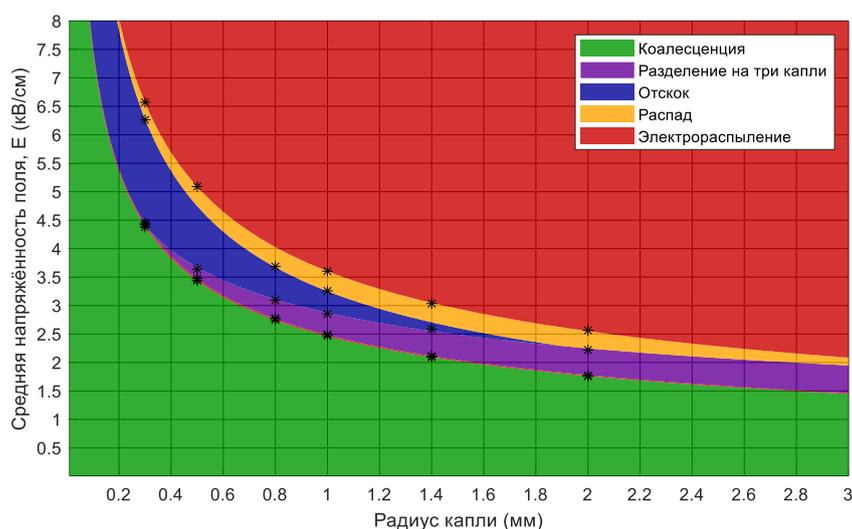


Рисунок 2. Карта режимов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда No. 22-79-10078, <https://rscf.ru/en/project/22-79-10078/>.

Литература:

1. Eow J., Ghadiri M. Electrostatic enhancement of coalescence of water droplets in oil: a review of the technology // *Chemical Engineering Journal*. 2002. Vol. 85, No. 2–3, P. 357–368.

© Д. Д. Сайфуллин, В. А. Чирков, 2023

СХОДСТВА И РАЗЛИЧИЯ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОКОАЛЕСЦЕНЦИИ ПРОВОДЯЩИХ НЕЗАРЯЖЕННЫХ КАПЕЛЬ ПРИ ПОСТОЯННОМ И ПЕРЕМЕННОМ НАПРЯЖЕНИИ

Черных Б.А.,
Магистрант 2 года обучения
физического факультета СПбГУ

Научный
руководитель: Чирков В.А., к.ф.-м.н.,
доцент, радиофизика, СПбГУ

Санкт-петербургский государственный университет
st069752@student.spbu.ru

Целью данной работы является исследование влияния использования переменного (импульсного) напряжения на процессы электрокоалесценции двух незаряженных проводящих капель воды в масле. Данное исследование интересно тем, что существуют экспериментальные работы, в которых утверждается, что переменное напряжение более эффективно в процессах электрокоалесценции, чем постоянное [1, 2]. Экспериментальные исследования не позволяют объяснить причину повышения эффективности, однако на основе актуальных численных моделей [3] можно попытаться определить, за счет каких различий от постоянного напряжения удастся повысить эффективность.

Для проведения исследования использовалось численное моделирование методом конечных элементов в COMSOL Multiphysics. Использовалась верифицированная (на основе эксперимента) численная модель, в которой решались уравнения гидродинамики (Навье-Стокса для несжимаемой среды) и электростатики. Для описания двухфазной среды использовался произвольный лагранжево-эйлеров метод. Он не имеет диффузной границы раздела, что позволяет описать изменение свойств жидкости именно на границе раздела фаз.

В результате была получена связь между значениями для постоянных и переменных напряжений. Для больших частот поведение капель аналогично поведению при постоянном напряжении (чем больше частота, тем больше схожесть), поэтому для каждого значения постоянного напряжения можно подобрать соответствующее значение переменного (через зависимость от деформации).

Литература:

1. Mhatre S. and Thakkar R., Electrocoalescence in non-uniform electric fields: An experimental study, Chem. Eng. Process. Process Intensif., vol. 96, pp. 28–38, 2015.
2. Anand V., Patel R., Naik V. M., Juvekar V. A., and Thakkar R. M., Modelling and particle based simulation of electro-coalescence of a water-in-oil emulsion, Comput. Chem. Eng., vol. 121, pp. 608– 617, 2019.
3. Utiugov G., Chirkov V., and Reznikova M., Application of the arbitrary Lagrangian-Eulerian method to simulate electrical coalescence and its experimental verification, Int. J. Plasma Environ. Sci. Technol., vol. 15, no. 2, p. e02009, 2021.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРТЫ РЕЖИМОВ ЭЛЕКТРОКОАЛЕСЦЕНЦИИ ДЛЯ СЛУЧАЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ «КАПЛЯ-СЛОЙ»

Ягодин Г.С.,
Магистрант 1 года обучения
физического факультета СПбГУ

Научный руководитель: Чирков В.А., PhD СПбГУ,
доцент, кафедра радиофизики, СПбГУ

*Санкт-Петербургский государственный университет
St077450@student.spbu.ru*

При добыче сырой нефти из нефтяных скважин используют методы, в результате которых образуется мелкодисперсная водяная эмульсия обратного типа [1], которую необходимо разделить на две фазы для дальнейшей обработки нефти. Так как плотности воды и нефти сравнительно близки и ввиду высокой вязкости нефти, отделение капель воды микронного размера под действием сил тяжести занимает продолжительное время, что сказывается на итоговой стоимости очищенных нефтепродуктов.

Существует несколько методов для ускорения процесса очистки эмульсий такие как: химическая обработка, гравитационное или центробежное осаждение, pH-регулирование, термообработка, мембранное разделение и электрокоалесценция [2]. Одним из наиболее эффективных методов из перечисленных является электрокоалесценция. Данный метод основан на механизме объединения капель воды под действием сильных электрических полей, в результате чего увеличивается средний объем капель и уменьшается время их осаждения под действием силы тяжести. Большинство соответствующих устройств — электродегидраторов — выводят каплю из объема масла путем ее объединения со слоем воды. При приближении капли воды к границе раздела «масло – слой воды» может произойти как полное объединение капли со слоем (коалесценция), так и частичное (частичная коалесценция) [3]. А при достаточно высоких напряженностях электрического поля капля может расплыться на более мелкие с последующим растяжением вплоть до замыкания межэлектродного промежутка. Очевидно, что последние два сценария нежелательны для появления в электродегидраторах, так как замедляется скорость разделения фаз и может произойти короткое замыкание.

Целью данной работы является рассмотрение влияния приложенного электрического поля на процесс взаимодействия капли со слоем, и определение пороговых значений напряженности электрического поля, при которых наблюдается частичная коалесценция и электрораспыление. Понимание процессов, связанных с поглощением слоем капли, помогут определить оптимальный режим работы электродегидраторов и избавиться от ряда вышеуказанных проблем.

Работа выполнена при помощи конечно-элементного моделирования в программном пакете Comsol Multiphysics. Модель включает в себя модуль электростатики и гидродинамики. Связь модулей осуществлена посредством задания на границу раздела фаз электростатического давления. Для описания движения линии геометрии использовался произвольный Лагранжево-Эйлеров метод [4] (который также называется методом подвижной сетки).

В результате моделирования были получены 3 возможных исхода: полная коалесценция, частичная коалесценция и электрорастяжение. А также построена карта электрокоалесценции (рис.1), описывающая пороги перехода от одного режима к другому для веществ со свойствами: масло с плотностью $\rho = 910 \text{ кг/м}^3$, динамической вязкостью $\eta = 0,065 \text{ Па}\cdot\text{с}$, относительной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 2,85$ и вода, для которой коэффициент межфазного натяжения по отношению к оливковому маслу равен $\gamma = 0,016 \text{ Н/м}$.

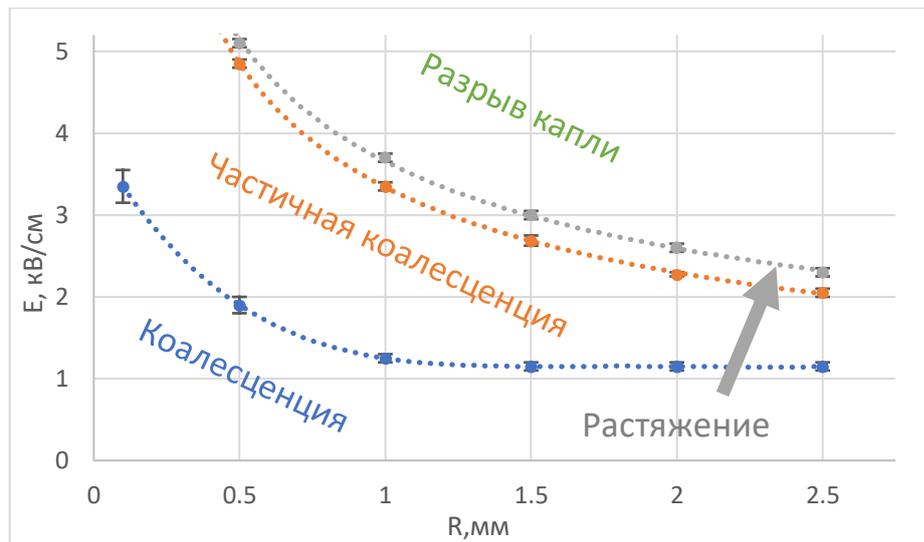


Рисунок 1. Карта электрокоалесценции.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-79-10078.

Литература:

1. D. G. Thompson, A. S. Taylor, D. E. Graham // *Colloids and Surfaces*, 15 1985. 175–189.
2. J. S. Eow, M. Ghadiri, A. O. Sharif, T. J. Williams // *Chemical Engineering Journal*, 84 2001. 173–192.
3. M. Mousavichoubeh, M. Ghadiri, M. Shariaty-Niassar // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 50:3 2011. 338–344.
4. V. A. Chirkov, M. P. Reznikova, A. V. Lashko, I. A. Dobrovolskii // *2nd International Conference on Dielectrics (Budapest)*, IEEE 2018. 1–4.

Устные доклады

Секция 6. Физика атомных ядер и
элементарных частиц, физика высоких
энергий.

ОПИСАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ МНОЖЕСТВЕННОСТИ В ПРОТОН-ПРОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ НА LHC

Бобылёв А.А.,
Бакалавр 4 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный
руководитель: Пучков А.М., к. ф.-м. н.,
научный сотрудник, кафедра ЯФМИ, СПбГУ

Санкт-Петербургский Государственный Университет
st087084@student.spbu.ru

Множественность — это число вторичных, заряженных частиц, возникающих при различных ядро-ядерных столкновениях, в частности при pp -столкновениях. Она является одной из важных характеристик при изучении сильных взаимодействий потому, что это самая первая и самая простая измеряемая величина в эксперименте, но при этом свойства ее распределения уже позволяют сделать целый ряд заключений. В настоящей работе для описания формы распределений множественности в pp -столкновениях использовался аппарат модифицированных комбинантов, которые вычислялись в рамках обобщенной модели мультипомеронного обмена (ММПО) [1, 2]. Цель состояла в том, чтобы выяснить можно ли с помощью ММПО правильно описать характерное осциллирующее поведение модифицированных комбинантов, которое было получено ранее в работе [3] на основе анализа данных в экспериментах ALICE[4] и CMS [5] на LHC. Для достижения этой цели были проведены расчеты для 12 различных распределений множественности при энергиях столкновения в системе центра масс $\sqrt{s} = 900; 2760; 7000; 8000 \text{ GeV}$. Анализ расчетов показал, что ММПО не может, даже на качественном уровне, описать осциллирующее поведение модифицированных комбинантов. Таким образом выяснилось, что ММПО ранее прекрасно себя показавшая при описании $\langle p_t \rangle - N_{ch}$ корреляций, тем не менее, требует существенной доработки для описания формы распределений множественности.

Литература:

1. Bodnya E.O., Kovalenko V. N., Puchkov A. M., Feofilov G.A. Correlation between mean transverse momentum and multiplicity of charged particles in pp and $p\bar{p}$ collisions: From ISR to LHC // AIP Conf. Proc. 2015. 1606. 22. P. 273–282.
2. Kovalenko V., Feofilov G., Puchkov A., Valiev F. Multipomeron Model with Collective Effects for High-Energy Hadron Collisions // Universe. 2022. №8, P. 246
3. Wilk G., Wlodarczyk Z..J. How to retrieve additional information from the multiplicity distribution // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 2017. G 44. 015002.
4. ALICE Collaboration; Charged-particle multiplicities in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 0.9$ to 8 TeV // Eur. Phys. J. 2017. C 77. 33.
5. The CMS Collaboration Charged particle multiplicities in pp interactions at $\sqrt{s} = 0.9, 2.36, \text{ and } 7 \text{ TeV}$ // JHEP. 2011. 01. 079.

© А.А. Бобылёв, А.М. Пучков, 2023

ПРЕЦИЗИОННЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ В ПРИСУТСТВИИ ИНТЕНСИВНОГО Г-ФОНА

Е.Ф. Бубнов^{1,2}, А.В. Дербин¹, И.С. Драчнев¹, Д.В. Иванов^{1,2}, В.А. Еремин³, И.М. Котина¹,
В.Н. Муратова¹, М.В. Трушин¹, Е.В. Унжаков¹

¹Петербургский институт ядерной физики

им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университе³ ФТИ им. А.Ф. Иоффе

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

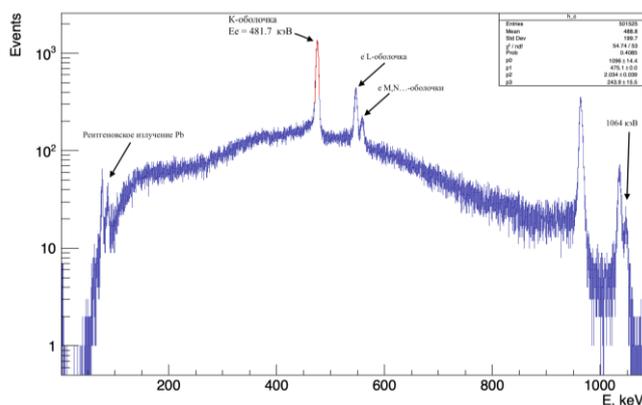
НИЦ «Курчатовский институт»

Bubnov_EF@npi.nrcki.ru

Ключевые слова: полупроводниковые детекторы, β -спектрометрия, годоскоп

При измерении β -спектров возникает проблема мешающего 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 энергии внутри детектора. Si(Li)-детектор фиксирует как γ -кванты, так и электроны, которые полностью теряют свою кинетическую энергию в объёме детектора. Обработка результатов проводилась при помощи метода совпадений [2] в программной среде ROOT CERN. Изучались совпадающие события в заданном временном окне. Для получения максимально возможного разрешения амплитуды обоих детекторов суммировались. 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 ^{207}Bi . 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 низкофонных измерений, в НИЦ «Курчатовский институт» ПИЯФ. В β -спектрометр помещались два полупроводниковых детектора: планарный и Si(Li), охлаждаемые жидким азотом. Планарный детектор толщиной 300 μm 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.

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 ± 0.18 кэВ.

Разработанная нами модель обработки данных позволяет получать спектры конверсионных электронов радионуклида ^{207}Bi с итоговым разрешением $\text{FWHM} = 4.79 \pm 0.04$ кэВ при интенсивном подавлении γ -фона. Суммарный спектр конверсионных электронов ^{207}Bi .

Литература:

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

© Бубнов Е.Ф., Дербин А.В., Драчнев И.С., Иванов Д.В., Еремин В.А., Котина И.М., Муратова В.Н., Трушин М.В., Унжаков Е.В., 2023.

СИСТЕМА МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВТОРИЧНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ

Землин Е.О., Жеребчевский В.И, Мальцев. Н.А

Санкт-Петербургский Государственный Университет
zemlin.egor2011@yandex.ru

Ключевые слова: диагностика, ускорители, вторичная электронная эмиссия

Сегодня проектирование и строительство новых ускорителей заряженных частиц и тяжелых ионов требует применения широкого спектра инженерных и технологических решений в этой области. Важной частью практически всех ускорительных комплексов является система мониторинга и диагностики пучков. В данной работе описана система мониторинга пучков заряженных частиц и тяжелых ионов. Система визуализирует профили пучков протонов, дейтронов, альфа-частиц и тяжелых ионов различных энергий и определяет положение и форму пучка.

В данной работе представлены экспериментальные данные, полученные на Уникальной научной установке (УНУ) "Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе циклотрон типа U-120" с использованием пучков протонов энергией 9 МэВ и ионов $^{40}\text{Ar}^{+8}$ энергией 53 МэВ. В ходе эксперимента были визуализированы профили этих пучков, исследованы параметры сигналов, генерируемые сенсорами системы при их взаимодействии с заряженными частицами пучка. Обработка этих данных позволила впервые определить коэффициенты вторичной электронной эмиссии материала сенсоров (вольфрама), используемых в многопроволочной системе мониторинга пучка, при их взаимодействии с ионами $^{40}\text{Ar}^{+8}$ энергией 53МэВ.

© Е.О. Землин, В.И. Жеребчевский, Н.А. Мальцев, 2023

ПОИСК ПРОЯВЛЕНИЯ КОСМОЛОГИЧЕСКИХ РЕЛИКТОВЫХ НЕЙТРИНО В β -СПЕКТРЕ ^{210}Bi

Иванов Д.В.,

Специалист 6 года обучения
инженерно-технологического
факультета СПбГТИ(ТУ)

Научные руководители: Дербин
А.В., д.ф.-м.н.,

зав. отделом п/п ядерных детекторов,
Драчнев И. С., с.н.с., Унжаков Е. В., с.н.с.
НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ
«Курчатовский институт»
ivanov_dv@pnpi.nrcki.ru*

Современная космологическая модель предсказывает существование реликтового нейтринного фона, обнаружение которого является сложной и актуальной проблемой. Перспективный метод наблюдения реликтовых нейтрино был предложен С. Вайнбергом в реакции обратного β -распада на ядрах трития [1], и впоследствии данная идея получила дальнейшее развитие [2].

Исследование возможности регистрации реликтовых нейтрино более тяжёлыми ядрами, как и непосредственное наблюдение реакции обратного β -распада, представляет фундаментальный интерес. В нашей работе мы использовали результаты 634-часовых измерений β -спектра ^{210}Bi , выполненных со спектрометром на основе Si(Li)-детекторов [3], чтобы изучить область граничной энергии $Q_\beta = 1162$ кэВ на признаки проявления реакции $\nu_e + ^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Po} + e^-$. 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].

На основании полученных данных, свидетельствующих об отсутствии статистически значимых пиков, были посчитаны верхние ограничения на число событий захвата нейтрино для 90% уровня достоверности. На рисунке 1 показан ожидаемый дополнительный вклад в измеренный спектр, соответствующий верхнему пределу в 79 событий (90% у. д.) при энергии электронов $E = 1162$ кэВ.

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 $\sigma_\nu \times \Phi_\nu \leq 1.4 \times 10^{-12} \text{ c}^{-1}$ [5].

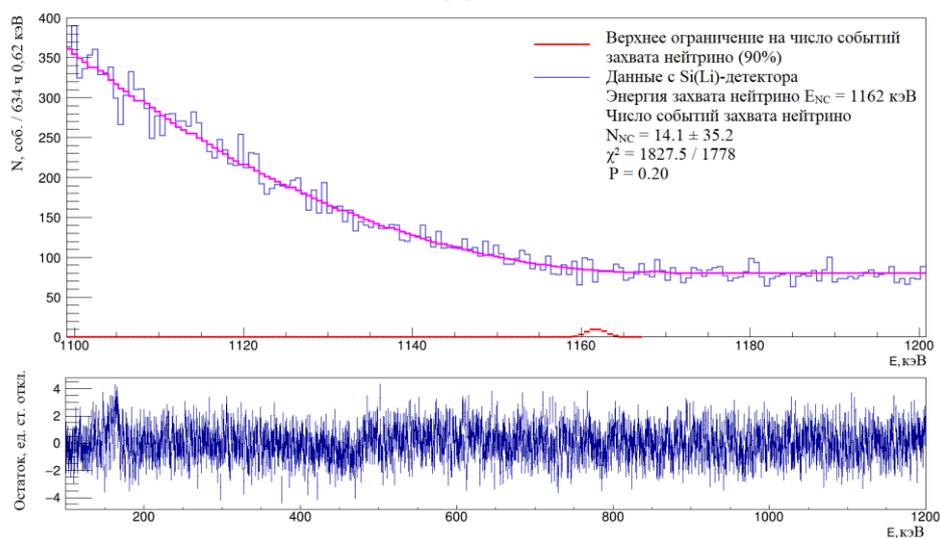


Рисунок 4 – Измеренный спектр в интервале (1100 – 1200) кэВ. Показана функция отклика детектора при энергии $E_{NC} = 1162$ кэВ, содержащая 79 событий (90% у. д.)

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

Литература:

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.

© Д.В. Иванов, А.В. Дербин, 2023

ИССЛЕДОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ДЕТЕКТОРОВ ДЛЯ ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННОЙ ТОМОГРАФИИ

Комарова Д. А.,
Бакалавр 4 года обучения
физического факультета СПбГУ

Научный руководитель:
Жеребчевский В. И., кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра ядерно-физических методов исследования

Санкт-Петербургский государственный университет
st103520@student.spbu.ru

В современном мире перед человечеством стоит множество глобальных проблем, затрагивающих население нашей планеты. Одной из таких проблем является борьба с чрезвычайно опасными заболеваниями, такими как сердечно-сосудистые и онкологические. В области ядерной медицины разрабатываются и применяются передовые методы диагностики, благодаря которым появилась возможность выявлять заболевания на очень ранних стадиях.

Позитронно-эмиссионная томография (ПЭТ) – это одновременно медицинский и исследовательский инструмент, широко используемый для визуализации опухолей и поиска метастазов в области клинической онкологии, а также для диагностики некоторых диффузных заболеваний головного мозга. Методика ПЭТ основана на использовании радионуклидов, которые могут испускать позитроны. Радионуклид, присоединенный к биологически активному веществу, вводится в организм пациента в качестве индикатора. В результате взаимодействия испущенных позитронов с электронами окружающего вещества испускаются гамма-лучи и регистрируются детекторами для формирования трехмерного изображения [1].

На сегодняшний день во многих промышленных ПЭТ-сканерах в качестве детектора гамма-квантов используют сцинтиллятор NaI(Tl). Однако, чтобы увеличить время высвечивания, а также коэффициент ослабления аннигиляционных фотонов, необходимо использовать кристалл BGO (германат висмута) [2].

В представленной работе проводились исследования характеристик сцинтилляционного кристалла BGO, а также пластического сцинтиллятора в контексте задач по их использованию в качестве сенсоров в новых приборах позитронно-эмиссионной томографии. Были сделаны оценки для того, чтобы выявить наилучший сцинтиллятор при регистрации гамма-квантов для метода ПЭТ.

Литература:

1. Kanhaiyalal A., Annah S., Abdulredha E., Sharjeel U. PET/CT Imaging Basics and Practice// Clinicians' Guides to Radionuclide Hybrid Imaging. 2022. 2 p.
2. Климанов В.А. Ядерная медицина. Радионуклидная диагностика 2-е изд.//Учебное пособие для академического бакалавриата. М. 2018. С. 200-201.

ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ СТЕНДЫ ДЛЯ АТТЕСТАЦИИ И НАСТРОЙКИ ОНДУЛЯТОРОВ

Комлев А.С.,
Научный сотрудник, НИЦ
Курчатовский институт

Ромашов А.С.,
Лаборант, НИЦ Курчатовский
институт

Абакумов Я.М.,
Инженер-конструктор, НИЦ
Курчатовский институт

Амиров А.А., к.ф.-м.н.,
Зам. Начальника отдела, НИЦ Курчатовский институт

НИЦ Курчатовский институт
alkomlev98@yandex.ru

Ондуляторы являются одними из основных источников излучения в синхротронах 4-го поколения [1]. Существует несколько традиционных методик аттестации качества распределения магнитного поля в зазоре ондуляторов: метод натянутой нити, сканирование датчиком Холла [2]. Оптимизация конструктивных особенностей этих измерительных методик была проведена в соответствии с техническими требованиями, предъявляемым к ондуляторам на постоянных магнитах для синхротрона СИЛА [3]. На данный момент реализован макет измерительного стенда с датчиком Холла, конструкция которого адаптирована под макет ондулятора, состоящего из одного периода. Проведенные экспериментальные измерения продемонстрировали высокую степень согласованности с теоретическими расчетами (Рисунок 1.). С целью анализа интегральной характеристики магнитного поля в зазоре ондулятора были начаты конструкторские работы по проектированию макета стенда с натянутой нитью.

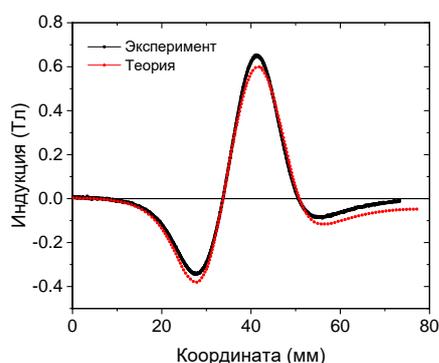


Рисунок 1. Экспериментальная и теоретическая зависимости распределения магнитного поля в зазоре макета ондулятора

В качестве дополнительного метода исследования распределения магнитного поля в зазоре ондулятора был предложен магнитооптический метод. Данный метод основан на измерении поворота плоскости поляризации света, проходящего через зазор ондулятора, в котором установлен оптически прозрачный кристалл. В докладе рассматривается принципиальная возможность реализации такого метода и целесообразность его использования для настройки различных типов источников ондуляторного излучения.

Комплексное использование существующих и разрабатываемых методик настройки ондуляторных систем 4-го поколения является ключевым шагом для достижения заявленных характеристик синхротрона “СИЛА”.

Литература:

1. Levichev E., Vinokurov N. Undulators and other insertion devices //Reviews of Accelerator Science and Technology. – 2010. – Т. 3. – №. 01. – С. 203-220.
2. Elleaume P., Chavanne J., Faatz B. Design considerations for a 1 Å SASE undulator //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2000. – Т. 455. – №. 3. – С. 503-523.
3. Kovalchuk M. V. et al. Fourth-Generation Synchrotron Radiation Source with X-ray Free-Electron Laser SILA: Concept of Accelerator–Storage Complex //Crystallography Reports. – 2022. – Т. 67. – №. 5. – С. 676-683.

© А.С. Комлев, А.С. Ромашов, Я.М. Абакумов, А.А. Амиров, 2023

SYSTEMATICS OF MAGNETIC MOMENTS OF THE BASIC STATES OF ATOMIC NUCLEI

Mbabazi M. E.,
Fourth year bachelor
Department of Nuclear Physics

Supervisor:
Mitropolsky I. A., Professor,
Department of Nuclear-Physics Research Methods

Saint Petersburg State University
st085553@student.spbu.ru

This work aims at studying nuclear magnetic moments, considering only ground state energy levels. To achieve this goal, it was proposed to review existing databases containing nuclear magnetic moments, make comparisons, and build a new database. Based on the data obtained, it was proposed to carry out systematics of the magnetic moments of nuclei. At the moment, are 2 sources of database: Stones' database and database of ENSDF. After observing both databases, my attention was driven with the fact that not all known values of magnetic moments would be found in both of them. In this work new database was made, it includes magnetic moments values from Stone, from ENSDF and new row with all known values of magnetic moment, there other important properties that were included in new database such as, spin, half-life, mass excess, link of experiment etc. In addition to all this there will be description of the database interface.

Only the ground states of nuclei with excitation energy $E = 0$ are involved in systematics.

All nuclei are divided into three groups: even-odd nuclei (the number of protons Z is even, the number of neutrons N is odd), odd-even nuclei (Z is odd, N is even) and odd-odd nuclei (Z is odd and N is odd). The ground states of even-even nuclei do not have a magnetic moment, and they are not considered at this stage. Graphs of dependency of magnetic moments from Z and A for fixed spins were plotted.

References:

1. N.J. Stone. Table of Recommended Nuclear Magnetic Dipole Moments: Part I - Long-lived States. Nov 2019 <https://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0794/>
2. <https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>
3. Мухин К.Н. Экспериментальная ядерная физика: Т.1// <<Лань>>,2008.

LOW ENERGY NUCLEAR ISOMERISM

Mbanza I. Y.,
Fourth year bachelor
Department of Nuclear Physics

Supervisor:
Novikov Yu. N., Doctor of Physics and Mathematics
Professor, Department of Nuclear Physics

Saint Petersburg State University
st085736@student.spbu.ru

This work aims to compile and to structure information about nuclear isomerism but especially low energy isomerism, and its applications in different areas of science. The low energy isomer in ^{229}Th with a negligible excitation energy for nucleus about 8.338 (24) eV [1] aroused the extraordinary interest of the world scientific community. Being in the optical zone, this isomeric state of ^{229}Th ($^{229\text{m}}\text{Th}$) is protected from destructive influence of external fields on the frequency of the nuclear transition, making it prime candidate for a good standard of frequency (nuclear clock). This makes it possible to study the stability of fundamental constants and to improve the accuracy of metrological data, that are necessary for all fields of science, technology and in everyday life.

References:

1. Kyeld L., Tomas S., Thorsten S., Johannes T., Maxim V., Ekkehard P., "The thorium-229 low energy isomer and the nuclear clock," *Nature Reviews Physics*, vol. 3, no. 238-248, pp. 5-7, 2021.
2. Martynova N. S., Elissev S. A., Novikov Y. N., Fulianin P. E., "Low energy nuclear isomerism," *Physics and Chemistry*, vol. 4 (62), no. 3, pp. 1-13, 2017.
3. Gusev Y. I., Karpeshin F. F., Novikov Y. N., Popov A. V., "Measuring the energy of ^{229}Th isomer decay," *Bulletin of the Russian academy of science: Physics*, vol. 83, no. 9, pp. 1-4, 2019.

ПРОТОННАЯ ТОМОГРАФИЯ: ВЧЕРА, СЕГОДНЯ, ЗАВТРА**В.В. Петров***, В.И. Жеребчевский, В.П. Кондратьев, Н.А. Мальцев, Е.О. Землин*Санкт-Петербургский государственный университет
v.petrov@spbu.ru**Ключевые слова: ядерная медицина, адронная терапия, протонная томография, детекторы ионизирующего излучения, цифровой калориметр*

На сегодняшний день активно развивается такая область ядерной медицины, как адронная терапия, включающая в себя лечение онкологических заболеваний методом облучения опухолевых образований протонами и тяжелыми ионами. Она имеет ключевое преимущество по сравнению с другими методами радиотерапии, например, с фотонной лучевой терапией, заключающееся в точном воздействии на область опухоли.

В настоящий момент в большинстве случаев для планирования лечения перед применением адронной терапии проводят рентгеновскую КТ-диагностику. Единицы ослабления интенсивности для рентгеновских фотонов пересчитываются в тормозные способности протонов. Однако принципиально разное взаимодействие протонов и фотонов с веществом приводит к погрешностям при таком пересчете, достигающим нескольких миллиметров. По этой причине, сегодня в научном сообществе утвердилось мнение о необходимости протонной визуализации при планировании лечения с помощью адронной терапии с использованием ускоренных протонов.

Данный доклад содержит обзор идей и инструментов, разработанных для получения томографических изображений органов и тканей с применением протонов. Показано последовательное развитие методов протонной томографии, новейшие достижения в этой области, а также роль Санкт-Петербургского государственного университета в разработке и создании нового цифрового калориметра для его использования в решении диагностических задач адронной терапии.

Работа выполнена в рамках программы ОИЯИ по поддержке научно исследовательских работ научных групп, сотрудничающих в рамках мегапроекта «Комплекс NICA» в 2023 году: <https://indico.jinr.ru/event/3364/>.

АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ГАЗОВОЙ ТРАНСПОРТИРОВКИ В РАЗНЫХ ГАЗОВЫХ ЯЧЕЙКАХ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ЭКЗОТИЧЕСКИХ НУКЛИДОВ

Д. Симоновски^{1,2}

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет

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

Санкт-Петербургский Государственный Университет

simonovski.dimitar@yandex.ru

Ключевые слова: экзотические нуклиды, сверхтяжелые элементы, газовая ячейка, масс-спектрометрия, газовая транспортировка

Метод Газовой Транспортировки (МГТ) радиоактивных нуклидов представляет собой экспериментальный метод, который успешно используется ещё с 60-тых годов прошлого столетия [1] с целью исследования основных физических свойств короткоживущих нуклидов таких, как их масса, период полураспада, спин. До настоящего времени данный метод показал свою эффективность при его адаптации и применении в решении разных задач экспериментальной ядерной физики. МГТ в настоящее время используется для разного рода физических и химических исследований короткоживущих нейтронно- и протонно-избыточных нуклидов и сверхтяжёлых ядер на реакторных [2] и ускорительных установках [3,5]. Одним из самых последних применений МГТ с целью исследований сверхтяжёлых ядер на масс-сепараторе TASCА [4,5] является использование нового типа газовой ячейки RTC (Recoil Transfer Chamber) для более эффективных исследований химических свойств сверхтяжёлых элементов. Другим примером является высокоплотная газовая ячейка UniCell.

В данной работе представлены сравнения результатов исследования основных параметров газовой транспортировки ядер в пяти вариантах газовых систем: а) Мишенной камеры, установленной на реакторе TRIGA (Mainz) [2]; б) Газовой ячейки MARA-LEB [3]; в) Газовой ячейки UniCell [4]; г) Газовой ячейки RTC [5]; д) Аксиально симметричного варианта газовой ячейки RTC. Для последовательного анализа описываются и излагаются особенности каждого физического задания, которое каждая газовая ячейка может решить, и особые экспериментальные условия, в которых каждая ячейка должна находиться в предположении:

- а) Получения продуктов ядерных реакции (реактор, ускоритель)
- б) Доставки (и фокусировки) потока заряженных продуктов ядерных реакции в газовую ячейку (масс-сепаратор вакуумный/газонаполненный)
- в) Способа быстрой эвакуации продуктов ядерных реакции методом МГТ из газовой среды (только газодинамический, с добавлением электромагнитных полей)

С целью сравнения эффективности разных подходов применения и адаптации МГТ при решении задач в своеобразных различных экспериментальных условиях были проведены математические расчёты и физические симуляции с использованием программы COMSOL Multiphysics. Их целью было получение основных параметров газовой транспортировки ядер таких, как среднее время и эффективность транспортировки (эвакуации) ядер из газовой среды.

В итоге излагаются выводы об оптимальных значениях полученных параметров транспортировки для исследования короткоживущих экзотических ядер у всех пяти рассматриваемых вариантов газовой ячейки.

Автор благодарит сотрудников лаборатории физики экзотических ядер ПИЯФ, института Гельмгольца и отдела ядерной химии в Майнце (Германия), группы IGISOL в ускорительной лаборатории JYFL (Финляндия) и химического отдела SHE Chemistry в институте GSI (Германия).

Литература:

1. MacFarlane R. et al. Nuclear Instruments and Methods 73. 1969.

2. Grund J. et al. First online operation of TRIGA-TRAP. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 972, 2020.
3. Zadornaya A. et al. Offline commissioning of a new gas cell for the MARA Low-Energy Branch. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 539, 2023.
4. Varentsov V. et al. Concept of a new Universal High-Density Gas Stopping Cell Setup for study of gas-phase chemistry and nuclear properties of Super Heavy Elements (UniCell). Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2019.
5. Yakushev A. et al. First Study on Nihonium (Nh, Element 113) Chemistry at TASCA. Frontiers in Chemistry. 9, 2021.
6. Khuyagbaatar J. Island of the stability: back to the future. The Virtual SHE seminar. 2021. URL: <https://webmaster.ncbj.gov.pl/events/superheavy-elements/program-2021>.

© Д. Симоновски, 2023

Устные доклады
Секция 7. Моделирование и
мониторинг геосфер.

ИССЛЕДОВАНИЕ КВАЗИ-СТАЦИОНАРНЫХ ПЕРЕСЕЧЕНИЙ ТС ХВОСТА МАГНИТОСФЕРЫ ЗЕМЛИ

Брыжахина Д.Д.,
Магистрант 1 года обучения
Физический факультет СПбГУ

Научный
руководитель: Апатенков С.В., к.ф.-м.н.,
доцент, кафедра физики Земли, СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
st072438@student.spbu.ru

Ключевые слова: токовый слой, магнитосфера, космическая плазма

В работе исследуется токовый слой (ТС) хвоста магнитосферы Земли в невозмущенных условиях. Изучаются пересечения токового слоя спутниками Cluster. Рассматриваемые события имеют длительности от 30 до 90 минут, являются спокойными по геофизическим меркам. Отличием от большинства предыдущих исследований является то, что сканирование токового слоя происходит преимущественно за счет собственного движения спутников, пересечения не вызваны флэппинг колебаниями или диполизациями. Изученные токовые слои вложенные, имеют толщины $1,5-2R_E$ или 40-100 протонных гирорадиусов. Три посчитанных вклада в ток: диамагнитный ток протонов, диамагнитный ток электронов, анизотропный ток электронов, в сумме близки к току, найденному по курлометру. Градиентный ток электронов вносит основной вклад в общую плотность тока ($1-4 \text{ нА/м}^2$) вблизи нейтрального слоя. Вдали от нейтрального слоя основной вклад вносят диамагнитные токи ионов и электронов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-47-00084 «Магнитное пересоединение в космической и лабораторной плазме: компьютерные симуляции и эмпирическое моделирование».

© Д. Д. Брыжахина, С. В. Апатенков, 2023

ИСТОЩЕНИЕ МЕЗОСФЕРНОГО ОЗОНОВОГО СЛОЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАЗЛИЧНЫХ УРОВНЕЙ ГЕОМАГНИТНОЙ АКТИВНОСТИ И СЕЗОНОВ

Гранкин Д.В.,
Магистрант 2 года обучения
Физический факультет СПбГУ

Научный
руководитель: Миронова И.А., к.ф.-м.н.,
с.н.с., кафедра физики Земли, Физический
факультет СПбГУ

Санкт-Петербургский Государственный Университет
d.grankin@spbu.ru

Магнитосфера Земли является открытой системой, внутри которой происходит множество процессов, имеющих значительное влияние на атмосферу Земли в частности и жизнь человека в целом. Частицы, имеющие Солнечное происхождение, распространяющиеся в направлении Земли в форме солнечного ветра, попадая в магнитосферу Земли, ускоряются. Эти частицы затем могут высыпаться в атмосферу, то есть достигать плотных слоёв атмосферы. Так электроны и протоны способствуют ионизации атмосферных частиц, запуская цепи химических реакций [1]. В частности, это приводит к разрушению мезосферного озонового слоя, особенно в областях высоких широт.

Воздействие магнитосферных частиц на атмосферу зависит от многих факторов: от уровня геомагнитной активности, от локации высыпаний, от времени года и времени суток.

В данной работе мы исследуем воздействие электронов (с энергиями >30 кэВ) солнечного происхождения на атмосферу Земли в диапазоне высот от 25 до 105 км над уровнем моря методами численного моделирования. Задачей работы является изучение разрушения мезосферного озона в зависимости как от уровня геомагнитной активности, так и от сезона на примере 2003 года.

Используя данные, полученные наблюдений прибора The Medium Energy Proton and Electron Detectors (MEPED) на борту спутника NOAA POES [2], мы получаем информацию о потоках энергичных электронов, производя затем расчёт функции ионизации атмосферы [3]. Полученные данные моделируются численно, с помощью одномерной фотохимической климатической модели атмосферы с интерактивной нейтральной и ионной химией [4], получая информацию о химическом составе атмосферы.

Истощение озона исследуется в зависимости как от планетарного Kp индекса геомагнитной активности [5], так и от времени года.

Исследование показало, что в периоды большой геомагнитной активности ($Kp \geq 5$) мезосферный озоновый слой может истощаться на 30-35 %. В периоды средней ($3 \leq Kp < 5$) и слабой ($Kp < 3$) геомагнитной активности мезосферный озон истощается на значения до 15% и 5% соответственно. В зависимости от сезона заметно, что наибольшее изменение в озоне наблюдается зимой (до -80%); летом, когда воздействие солнечного излучения доминирует, наблюдается малое изменение озона (до -1-3%) вследствие высыпаний энергичных электронов.

Литература:

1. Mironova I.A., Aplin K.L., Arnold F., Bazilevskaya G.A., Harrison R.G., Krivolutsky A.A., Nicoll K.A., Rozanov E.V., Turunen E., Usoskin I.G. Energetic Particle Influence on the Earth's Atmosphere //Space Sci. Rev. 2015, 194, 1–96. <https://doi.org/10.1007/s11214-015-0185-4>.
2. Данные прибора MEPED NOAA POES (дата последнего обращения 20 июня 2023): <https://www.ngdc.noaa.gov/stp/satellite/poes/index.html>
3. Mironova, I., Kovaltsov, G., Mishev, A., Artamonov, A. Ionization in the Earth's Atmosphere Due to Isotropic Energetic Electron Precipitation: Ion Production and Primary Electron Spectra //Remote Sens. 2021, 13, 4161. <https://doi.org/10.3390/rs13204161>
4. Ozolin Y.E., Karol' I.L., Rozanov E.V., Egorova T.A. A model of the impact of solar proton events on the ionic and gaseous composition of the mesosphere //Izv. Atmos. Ocean. Phys. 2009, 45, 737–750. <https://doi.org/10.1134/S0001433809060073>.

5. Данные индексов геомагнитной активности (дата последнего обращения 20 июня 2023):
<https://omniweb.gsfc.nasa.gov/cgi/nx1.cgi>.

© Д.В. Гранкин, И.А. Миронова, 2023

ОЦЕНКА МОЩНОСТИ ГИДРОГЕННЫХ ТАЛИКОВ ПО ДАННЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ТОМОГРАФИИ И ТЕПЛООВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Гребенюк В.А.,
Магистрант 1 года обучения
университета ИТМО

Научный
руководитель: Бобров Н.Ю., к.ф.-м.н,
доцент кафедры геофизики СПбГУ

Университет ИТМО
vasya.31.46@gmail.com

Целью данной работы являлось сравнение оценок мощности гидрогенных таликов в криолитозоне по данным электрической томографии и моделирования теплового поля. Были рассмотрены талики под двумя термокарстовыми озерами, которые расположены в двух точках, заметно отличающихся климатическими условиями.

Электротомография – один из наиболее разработанных методов инженерной геофизики, отличающийся высокой разрешающей способностью. Метод удобен для работы на поверхности водоёмов и позволяет получать подробные геоэлектрические разрезы. В работе были использованы данные электротомографии, полученные в 2017-2021 гг. на двух термокарстовых озёрах: на острове Самойловском в дельте реки Лена и на полуострове Ямал. Поперечные размеры озёр близки и составляют несколько сотен метров, глубина – около 5 м. Для инверсии данных были использованы программы ZondRes2D и ZondRes3D. По результатам инверсии можно утверждать, что талик под озером в дельте Лены ограничен снизу и его максимальная мощность составляет около 16 м, однако оценка не может считаться достаточно надёжной, поскольку инверсия сглаживает контрастные геоэлектрические границы.

При значительной мощности талика глубинность метода со стандартными электроразведочными косами (до 235 м) оказывается недостаточной для получения надёжной информации о подошве талика. Так, на озере на п-ове Ямал данные электротомографии не позволяют сделать однозначный вывод о том, является талик сквозным или закрытым.

Для проверки результатов электротомографии в программе COMSOL Multiphysics было проведено моделирование теплового поля, позволившее воспроизвести образование толщи многолетнемёрзлых пород и возникновение гидрогенного талика под не промерзающим до дна озером. В качестве граничных условий задавалась среднегодовая температура на поверхности и величина теплового потока из недр Земли, которые отличаются для двух выбранных участков. В процессе усовершенствования тепловой модели была выбрана оптимальная модель озера (эллиптический конус) и наиболее близкая к экспериментальным данным зависимость температуры дна от глубины.

Результаты моделирования теплового поля, в целом, соответствуют результатам, полученным при инверсии данных электротомографии. Оценка глубины талика под озером в дельте Лены составляет 24,6 м, что приблизительно в полтора раза больше, чем при оценке с помощью электротомографии. Тепловое моделирование показало, что при заданных граничных условиях под озером на Ямале должен образоваться сквозной талик.

Расчёты выполнялись с использованием возможностей, предоставляемых Ресурсным центром «Вычислительный центр» СПбГУ.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПУЧКОВ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИХ ТЕМПЕРАТУРЫ В PIC-МОДЕЛИРОВАНИИ МАГНИТНОГО ПЕРЕСОЕДИНЕНИЯ С ХОЛОДНЫМИ ИОНАМИ

Чжун Дахуа,
Магистрант 2 года обучения
кафедры физики Земли СПбГУ

Научный руководитель:
Дивин А.В., к.ф.-м.н.,
с.н.с., кафедра физики Земли, СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
zdh97@outlook.com

Магнитное пересоединение — универсальный процесс преобразования накопленной магнитной энергии в кинетическую и тепловую энергию плазмы. На ночной стороне, в хвосте магнитосферы Земли, магнитное пересоединение является источником быстрых потоков, устремленных к Земле и приводящим к геомагнитным возмущениям, высыпаниям энергичных частиц и ярким полярным сияниям. Механизмы ускорения частиц в процессе пересоединения изучаются уже несколько десятилетий, и многие явления стали нам понятны. В последнее время одним из актуальных вопросов в этой области стало изучение динамики и механизмов ускорения низкоэнергетических частиц, так называемых холодных ионов. Такие частицы, зачастую имеющие ионосферное происхождение, обладают энергией около десятка электрон-вольт, в отличие от ионов, попадающих в магнитосферу из солнечного ветра, где типичная энергия протона 1 кэВ. Низкая тепловая энергия таких частиц позволяет, в результате их ускорения в диффузионной области и на сепаратрисах магнитного пересоединения, генерировать ионные пучки, явно различимые друг от друга и составляющие комплексную немаксвелловскую функцию распределения. Методы машинного обучения без учителя позволяют идентифицировать отдельные пучки и структуры функции, а также определить их характерные параметры. Одним из таких методов является Gaussian Mixture Model (GMM) аппроксимирующий данные как совокупность нескольких нормальных распределений. Подобный подход к немаксвелловским функциям распределения позволяет не только получать больше информации о состоянии плазмы, но и вводить новые оценки её параметров. Например, температуру плазмы можно определять как 2-й момент функции распределения (стандартный способ), а можно найти как средневзвешенное температур каждого отдельного пучка.

В этой работе мы на данных кинетического моделирования методом “Частица-в-ячейке” (Particle-in-Cell, PIC) магнитного пересоединения с популяцией холодных ионов определяем отдельные пучки с помощью метода GMM. На основе параметров найденных пучков мы оцениваем температуру плазмы как средневзвешенную температуру пучков, исследуем нагрев в выхлопе пересоединения и сравниваем с классической температурой, рассчитанной как 2-й момент функции распределения.

© Чжун Дахуа, А.В. Дивин, 2023

Постерные доклады

ГРАДИЕНТНЫЕ СОПОЛИМЕРЫ СТИРОЛА И ИЗОПРЕНА В СЕЛЕКТИВНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ: МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Алимова А.Е.

студентка 2 курса магистратуры
кафедры молекулярной биофизики
и физики полимеров СПбГУ

Научный руководитель:

Лезов А.А.

к. ф.- м. н. кафедры молекулярной биофизики
и физики полимеров СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет

st069775@student.spbu.ru

Ключевые слова: градиентные сополимеры, блочные сополимеры, динамическое рассеяние света, статическое рассеяние света, моделирование.

Градиентные сополимеры являются одним из перспективных объектов для исследования физикохимии полимеров. Их свойства в селективных растворителях в достаточной мере отличаются от свойств блочных и статистических сополимеров. Было проведено сравнительное исследование образцов с градиентным и блочным распределением звеньев стирола и изопрена в толуоле и при добавлении ацетона, который является осадителем для стирола.

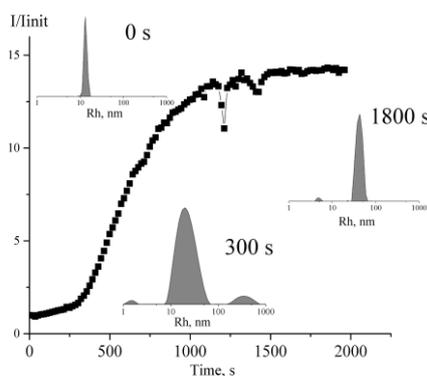
Согласно результатам исследования методом статического рассеяния света представленные образцы обладают близкими молярными массами и радиусами инерции R_g . Для обоих образцов толуол является хорошим растворителем, о чем свидетельствуют положительные значения второго вириального коэффициента (см. Таб. 1).

Таблица 1. Молекулярные характеристики исследованных образцов в толуоле.

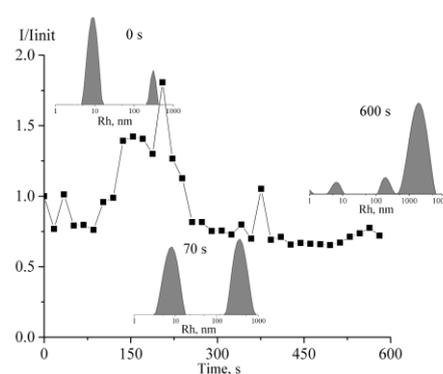
Образец	D, см ² /с	Rh, нм	Mw, г/моль	A ₂ , моль · см ³ /г ²	Rg, нм	ρ	[η], дл/г	A ₀
RB_B050	1,65E-07	22	412000	4,70E-04	27	1,2	2,15	3,10E-10
RB_B051	1,47E-07	25	590000	6,50E-04	37	1,5	2,4	3,30E-10

Характеристическое отношение ρ , определенное как отношение $\rho = R_g/R_h$ показывает, что форма рассеивающих центров в растворе соответствует набухшему клубку. Высокие значения гидродинамического инварианта, также могут свидетельствовать о набухании исследованного полимера в толуоле.

К растворам в толуоле добавлялся ацетон при постоянном перемешивании, при этом визуально контролировалась их прозрачность. При появлении помутнения ацетон добавлять прекращали, растворы нагревали до 50° до исчезновения мутности. После чего нагретые образцы помещали в термостат 25° С и анализировали картину статического и динамического рассеяния с течением времени.



а



б

Рисунок 1. Зависимости интенсивности рассеянного света от времени нахождения образца в установке при его термостатировании с до 25° С. На вставках показаны распределения интенсивности рассеяния по гидродинамическим радиусам и указано время, проведенное в термостате.

Для градиентного сополимера наблюдалось формирование в растворе частиц с радиусом порядка 50 нм, при этом раствор оставался достаточно долгое время стабильным. Радиусы крупных частиц в растворе не изменялись в течении, по крайней мере, нескольких часов после измерения. Через сутки происходило фазовое разделение раствора. В растворе блочного сополимера RB.V051 фазовое разделение происходило без формирования промежуточных структур. После 10 минут в установке при температуре 20 градусов согласно данным ДРС в растворе появлялись частицы, с гидродинамическим радиусом более сотни нанометров, затем в растворе появлялись крупные, видимые глазом образования, которые формировали осадок.

Экспериментальный результат коррелирует с данными, полученными методом крупнозернистого моделирования.

© А.Е. Алимова, А.А. Лезов, 2023

ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ СХЕМЫ ПРОБОПОДГОТОВКИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ В ТАБАКЕ ДЛЯ КАЛЬЯНА МЕТОДОМ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ

Булатова Т.С.,

бакалавр 3 курса обучения Института химии СПбГУ

Научный руководитель: Савинов С.С.,
к.х.н., старший преподаватель,
кафедра аналитической химии,
Институт химии СПбГУ

*Санкт-Петербургский государственный университет
st095073@student.spbu.ru*

Курение табака представляет опасность для организма человека. Помимо содержания никотина важным аспектом является присутствие токсичных металлов, таких как Cd, Cr, Ni, Pb и др. Поскольку кальянный табак в отличие от сигаретного не подлежит обязательной сертификации, проблема определения содержания тяжелых металлов в табачной продукции становится особенно острой и актуальной. Для количественного многоэлементного анализа хорошо подходит метод атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП). Однако, из-за сложной матрицы кальянного табака анализ включает этап пробоподготовки, что, в зависимости от методики разложения, увеличивает общую продолжительность и трудоемкость работы, а также непосредственно влияет на результаты измерений. В настоящее время различными авторами предлагается несколько вариантов кислотной минерализации, отличающихся как по перечню и количеству используемых реактивов, так и по длительности процедуры. Цель данной работы – выбор оптимальной схемы пробоподготовки (кислотной минерализации) кальянного табака для последующего определения элементного состава методом АЭС-ИСП.

Работа выполнялась на спектральном приборе Shimadzu ICPE-9000 при типовых условиях (мини-горелка, мощность ВЧ-поля 1.2 кВт, охлаждающий поток 10 л/мин, плазмообразующий поток 0.6 л/мин, пробоподающий поток 0.7 л/мин, время экспозиции 10 с, аксиальный обзор, пневматическое распыление пробы). Градуировочные зависимости были построены с использованием растворов, полученных разбавлением 1% азотной кислотой смеси многоэлементных растворов CertiPUR IV и ICP-MS-68B.

Процесс разложения был проведен для следующих марок табака для кальяна: Darside, Overdose и Spectrum. Выбор оптимальной схемы пробоподготовки заключался в проведении кислотной минерализации предварительно измельченной в агатовой ступке пробы табака по схемам (табл. 1), предложенным в нормативном документе [1] и научной литературе [2-4]. Масса навески составляла 0.5 г, для каждой пробы в каждой схеме разложения было проведено три параллельных определения. Также дополнительно проводился холостой опыт.

Таблица 1. Схемы кислотного разложения (масса навески 0.5 г).

№ схемы	Смесь кислот
1	3.6 мл HNO ₃ + 0.8 мл HClO ₄
2	3.6 мл HNO ₃ + 0.8 мл HClO ₄ + 0.8 мл H ₂ O ₂
3	4 мл HNO ₃ + 2 мл H ₂ SO ₄ + 1.6 мл HClO ₄
4	4 мл HNO ₃ + 2 мл H ₂ SO ₄ + 1.6 мл H ₂ O ₂
5	3.6 мл HNO ₃ + 0.8 мл H ₂ O ₂

По результатам измерений оптимальными схемами разложения оказались схемы 1 и 2, поскольку позволяли извлечь из матрицы пробы максимальное количество элементов, давали результаты анализа с наименьшей погрешностью, характеризовались минимальным значением сигнала холостого опыта, а также были наиболее экспрессными и наименее трудоемкими. Впоследствии по ним была проведена микроволновая минерализация проб кальянного табака, а также проверка правильности данных методом «введено-найдено».

Авторы выражают благодарность ресурсному центру Научного парка СПбГУ «Методы анализа состава вещества», чье оборудование было использовано при выполнении исследования.

Литература:

1. ГОСТ 26929-94. Сырье и продукты пищевые. Подготовка проб. Минерализация для определения содержания токсичных элементов. 2010.
2. Zaprjanova P.S., Angelova V.R., Bekjarov G.L. and Ivanov K.I. AAS and ICP Determination of Heavy Metal Content in Tobacco // Bulgarian Journal of Agricultural Science. 2006. № 12. P. 537-551.
3. Ryan Saadawi, Julio Alberto Landero Figueroa, Traci Hanley and Joseph Caruso. The hookah series part 1: total metal analysis in hookah tobacco (narghile, shisha) – an initial study // Anal. Methods. 2012. № 4. P. 3604-3611.
4. Syed Ghulam Musharraf, Muhammad Shoaib, Amna Jabbar Siddiqui, Muhammad Najam-ul-Haq and Aftab Ahmed. Quantitative analysis of some important metals and metalloids in tobacco products by inductively coupled plasma-mass spectrometry (ICP-MS) // Chemistry Central Journal. 2012. № 6.

© Т.С. Булатова, С.С. Савинов, 2023

АНАЛИЗ ОСТАТОЧНОГО СОДЕРЖАНИЯ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ БЕНЗОТРИАЗОЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА

Домарева Н.П.¹, Петрова М.С.¹,

Семенов А.В.¹, Гончаров В.В.¹,

¹ - Магистрант 2 года обучения
мегафакультет наук о жизни, НИУ «ИТМО»

Научный руководитель:

Масалович М.С. к.х.н., доцент
мегафакультет наук о жизни, НИУ «ИТМО»

НИУ «ИТМО»

domarevanat@gmail.com

Современные исследования в области науки о коррозии ставят перед собой важную задачу — поиск экологически чистых органических соединений, которые могли бы служить ингибиторами коррозии в промышленной сфере. Особый интерес представляют органические ингибиторы, в составе которых имеется гетероатом: азот, фосфор, сера и кислород. Этот подход не только экономичен, но и практичен при защите углеродистой стали или меди от коррозии [1].

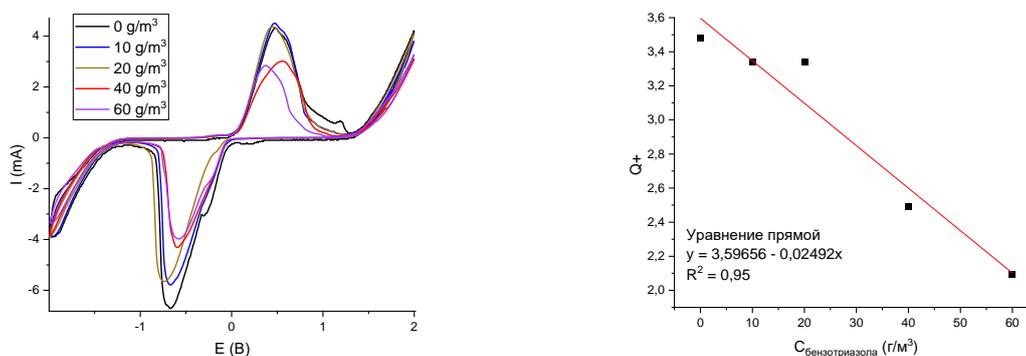


Рис. 1. а) Анализ изменений в циклических вольтамперограммах на электроде "мишень" при варьировании концентрации ингибитора бензотриазола. б) Построение калибровочных зависимостей интегрального тока (Q^+) от концентрации."

Настоящее исследование посвящено анализу и изучению ингибитора коррозии бензотриазола с целью эффективного снижения процесса коррозии. В ходе нашей работы были установлены оптимальные формы электродов и рекомендуемая рабочая концентрация данного ингибитора в модели пластовой воды.

На первом этапе исследования мы оценивали различные типы электродов и их эффективность, сфокусировавшись на ключевых параметрах, включая интенсивность тока и количество передаваемого заряда. Результаты подтвердили преимущество электродов типа "мишень" в пластовой воде благодаря их большей площади поверхности, включая рабочий и вспомогательный электроды.

На втором этапе исследования мы провели серию экспериментов, исследуя взаимосвязь силы электрического тока с потенциалом при разных уровнях концентрации ингибитора бензотриазола (рис.1а). Полученные данные использовались для создания калибровочных графиков (рис 1б), которые демонстрировали обратную линейную зависимость между концентрацией ингибитора и измеряемыми параметрами. Коэффициент детерминации (R^2) составил высокие значения (0,99) для бензотриазола, и мы также установили порог обнаружения в 2 г/м³, что является минимальной концентрацией для надежного определения наличия ингибитора в образце.

Литература:

1. Mendonça G. L. F. et al. Understanding the corrosion inhibition of carbon steel and copper in

sulphuric acid medium by amino acids using electrochemical techniques allied to molecular modelling methods //Corrosion Science. – 2017. – Т. 115. – С. 41-55.

© Н.П. Домарева, М.С. Петрова, А.В. Семенов, В.В. Гончаров, М.С. Масалович, 2023

РАЗРАБОТКА ОБОБЩЕННОЙ СИСТЕМЫ РАЗВЕРТЫВАНИЯ СЕРВИСА МОНИТОРИНГА ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ ЭКСПЕРИМЕНТА VM@N ПРОЕКТА NISA

Дорофеев К.Д.,
Бакалавр 4 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный руководитель:
Немнюгин С.А,
к.ф.-м.н., доцент,
кафедра вычислительной физики, СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
st085040@student.spbu.ru

Современные физические эксперименты характеризуются высокой сложностью и трудоемкостью, а также требуют огромной инфраструктуры программного и аппаратного обеспечения. Из-за этого существует определенный риск сбоя в работе подсистем эксперимента, который может привести к серьезным последствиям. Для минимизации времени реакции и восстановления различных программных и информационных систем в случае аппаратных или программных проблем необходимо отслеживать состояние данных подсистем, что является критически важным во время проведения сеансов экспериментов.

Целью работы являлся анализ возможностей платформы для визуализации и мониторинга данных Grafana [1], а также создание программы для упрощенного развёртывания сервиса мониторинга.

Каждая панель визуализации содержит основные параметры: источник данных (база данных), SQL-запрос для получения данных для визуализации, форматирование данных и параметры осей. Также имеются дополнительные настройки визуального представления данных. Форма представления данных унифицирована, поэтому для рассматриваемых систем отличаются лишь названия подструктур базы данных. Поэтому одним из вариантов решения поставленной задачи было использование «переменных» [2], которые дают возможность производить подстановку значений (произвольных или из фиксированного списка) в места, где была использована данная переменная. Такое решение не было реализовано из-за того, что не все панели используют один псевдоним источника данных.

После анализа альтернативных вариантов было принято решение использовать Grafana HTTP API [3], который позволяет управлять дашбордами и панелями с помощью HTTP-запросов. Для этого была создана программа на языке Python, которая на основе конфигурационного файла создает дашборд с необходимыми панелями. Данная программа состоит из независимых классов (классы аутентификации, обработки конфигурационного файла, создания каждой панели из конфигурационного файла, объединения созданных панелей в единый JSON-файл дашборда, а также класс работы с API), что в будущем позволит использовать альтернативные классы для конкретных нужд, не меняя логики работы программы.

В ходе выполнения курсовой работы была решена важная задача по упрощению и унифицированию системы развёртывания сервиса мониторинга для новых информационных систем эксперимента VM@N. Разработанная программа для генерации наборов панелей позволяет автоматически создавать панели для различных подсистем эксперимента. Это упрощает и ускоряет процесс визуализации данных, что является важным фактором для успешного мониторинга работы программных систем и оперативного реагирования на сбой в их работе.

Литература:

1. Grafana. [Электронный ресурс] <https://grafana.com/grafana/> (дата обращения 13.10.2023).
2. Grafana dashboard variables. [Электронный ресурс] <https://grafana.com/docs/grafana/latest/dashboards/variables/> (дата обращения 13.10.2023).
3. Grafana HTTP API. [Электронный ресурс] https://grafana.com/docs/grafana/latest/developers/http_api/ (дата обращения 07.06.2023).

ЧЕРНЫЕ ОБЪЕКТЫ В ЭЙНШТЕЙН-ДИЛАТОНОВСКОЙ ГРАВИТАЦИИ В ПРЕДЕЛЕ БОЛЬШОГО ЧИСЛА ИЗМЕРЕНИЙ

Зуева А.Н.,

Магистрант 2 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный руководитель: Новиков О.О.,
кандидат физ.-мат. наук,
доцент кафедры ФВЭиЭЧ СПбГУ

*Санкт-Петербургский государственный университет
azueva40@gmail.com*

Целью данной работы является нахождение решений уравнений движения для дилатона в пространстве Анти-де Ситтера (АдС) и в пространстве АдС в присутствии черной дыры, а также исследование перехода между двумя этими фазами.

Исследование термодинамики сферически симметричных черных дыр в АдС Хокинга и Пейджа [4] установило существование фазового перехода: высокотемпературные черные дыры стабильны, в то время как низкотемпературные черные дыры нестабильны и распадаются. В пределе большого числа измерений D динамика черных дыр заметно упрощается [2]. В пределе $D \rightarrow \infty$ гравитационное поле черной дыры отсутствует за пределами области вблизи горизонта, и, таким образом, существует четкое разделение между черной дырой и фоном, на котором она находится. Тогда черную дыру эффективно можно отождествить с поверхностью Σ_B на этом фоне. Так как свойства черной дыры определяются уравнениями Эйнштейна, существует возможность получить из них набор уравнений [3], которым будет удовлетворять Σ_B . Такие уравнения и составляют эффективную теорию черной дыры в пределе большого D .

В данной работе рассматриваются уравнения движения для дилатона в пустом пространстве Анти-де Ситтера и в АдС с горизонтом в пределе большого числа измерений. Затем строится эффективная теория для нейтральной черной дыры в присутствии дилатона и космологической постоянной. Уравнения для вложенной поверхности Σ_B принимают простую форму: если K – след внешней кривизны поверхности Σ_B , а g_{tt} – временная компонента метрики на этой поверхности, тогда в ведущем порядке эффективное уравнение есть $\sqrt{g_{tt}}K = 2\kappa$, где κ – поверхностная гравитация черной дыры. Найденная форма поверхности является ключевой в обсуждении вопроса о фазовом переходе в пространстве Анти-де Ситтера при конечной температуре.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-12-00020.

Литература:

1. Emparan R. et al. Effective theory of Black Holes in the 1/D expansion //Journal of High Energy Physics. – 2015. – Т. 2015. – №. 6. – С. 1-32.
2. Emparan R., Suzuki R., Tanabe K. The large D limit of General Relativity //Journal of High Energy Physics. – 2013. – Т. 2013. – №. 6. – С. 1-48.
3. Gourgoulhon E. 3+ 1 formalism and bases of numerical relativity //arXiv preprint gr-qc/0703035. – 2007.
4. Hawking S. W., Page D. N. Thermodynamics of black holes in anti-de Sitter space //Communications in Mathematical Physics. – 1983. – Т. 87. – С. 577-588.

СОЗДАНИЕ И ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ ОБТЕКАНИЯ ВОЗДУШНОГО ВИНТА БЕСПИЛОТНОГО ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

Иванов М.И.,

Бакалавр 4 года обучения,
физического факультета Санкт-
Петербургского государственного
университета

Научный

руководитель: Елагин И.А.,
Старший преподаватель, Кафедра радиофизики, НИИФ

*Санкт-Петербургский государственный университет
st059257@student.spbu.ru*

В современном мире беспилотные авиационные технологии постепенно выполняют всё больше количество задач – от геологоразведки до доставки грузов и поиска пропавших людей. Многие из этих задач наиболее эффективно могут быть решены с применением беспилотников с двигателем в виде воздушного винта.

В современной среде разработчиков беспилотных авиационных систем, при этом, сохраняется крайне низкий научно-технический уровень, что обуславливается как социально-экономическими факторами: на работу в наиболее перспективные и бурно развивающиеся компании принимают людей без специального образования (бывших авиамоделистов), могущих просто сделать что-то летающее заданной формы – на данный момент даже такой уровень разработки на гражданском рынке позволяет успешно её продавать, так и историческими: изначально более активно разработкой и продвижением беспилотной повестки занялись люди, связанные с программированием и электроникой, и в меньшей степени связанные с проектированием, различного вида расчетами, аэродинамикой, в том числе по этой причине подавляющее большинство гражданских беспилотников, как в России, так и зарубежом представлены самыми разнообразными коптерными схемами, ведь они не требуют от разработчика хоть сколько то глубоких познаний в проектировании роботизированных и в особенности летающих роботизированных систем. Достаточно просто собрать аппарат как конструктор (иногда с небольшими доработками, однако он останется конструктором), подобрать по составленным таблицам или личному опыту одну из готовых винтомоторных групп общего назначения (т.к. именно такие наиболее широко распространены, и производитель делает товар, который сможет как-то работать с как можно большим количеством коптеров) и, за исключением программного обеспечения, аппарат уже пригоден к полету.

Но даже с таким подходом необходимость в качественно разработанных воздушных винтах и винтомоторных группах сохраняется, и через определенное время рынок окончательно заполнится дронами низкого качества, возникнет потребность в улучшениях в самом подходе к разработке в целом и к расчету беспилотников в частности, в том числе возникнет потребность в соответствующей подобным геометриям (5 – 17 дюймов) и частотам обращения до $\omega = 600$ (Гц) численной модели для расчета воздушного винта. Такой модели и посвящена данная работа.

Целью работы было создание подходящей верифицированной численной модели. В качестве результатов приводятся конкретные параметры и настройки, определяющие численную модель а также способ повышения скорости ее расчета.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ДНК МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Иванова Д.Н.,
Магистрант 1 года обучения
физического факультета СПбГУ

Научный руководитель: Пастон С.В., к.ф. –
м.н. доцент, кафедра молекулярной
биофизики и физики полимеров

Санкт-Петербургский государственный университет
st076983@student.spbu

Ключевые слова: ДНК, гидратация, вторичная структура, ИК Фурье спектроскопия

Вторичная структура ДНК определяется ее взаимодействием с молекулами растворителя. В клетке и в водных растворах вода и низкомолекулярные ионы встроены в структуру ДНК. Высокая диэлектрическая проницаемость воды и гидратированные противоионы ослабляют электростатическое отталкивание фосфатных групп комплиментарных нитей ДНК. Гидрофобные азотистые основания уходят от контактов с водой, группируясь в центре двойной спирали. Степень гидратации ДНК Γ определяет форму вторичной структуры макромолекулы: при $\Gamma \geq 20 \frac{\text{молекул воды}}{\text{нуклеотид}}$ ДНК находится в В-форме, при $\Gamma \leq 20 \frac{\text{молекул воды}}{\text{нуклеотид}}$ вторичная структура ДНК относится к А- либо к С-семейству, в зависимости от природы противоиона [1]. Вторичная структура ДНК является важнейшим фактором ее функционирования.

В данной работе исследуется вторичная структура ДНК в водно-солевом растворе и пленках различной влажности методом ИК Фурье спектроскопии. Регистрация спектров проводилась непрерывно в процессе высушивания капли раствора ДНК на кристалле приставки НПВО потоком сухого азота. Количество воды в исследуемых образцах таково, что ИК-спектры на начальном этапе высушивания содержат только спектральные полосы, характерные для колебаний молекулы воды. В ИК-спектрах пленок при малом содержании воды наблюдаются линии ИК-спектра ДНК, которые видоизменяются при снижении влажности пленок. Эти изменения можно интерпретировать как признаки В-А перехода во вторичной структуре ДНК. Одним из основных маркеров В-А перехода является положение пика, вызванного асимметричными валентными колебаниями фосфатных групп PO_2^- : положение $1225\text{-}1220 \text{ см}^{-1}$ отвечает В-форме, а $1245\text{-}1235 \text{ см}^{-1}$ – А-форме [2]. Каждый полученный спектр был нормирован на интенсивность своего пика $963 \pm 2 \text{ см}^{-1}$ (вызванный валентными колебаниями связей С-С сахаро-фосфатного остова). Связи С-С и не образуют связей с ионами из раствора, поэтому спектральные изменения данного пика незначительны в рассматриваемом эксперименте. Процедура нормировки позволила устранить ошибку в концентрациях, которая возникает при высушивании образцов. В процессе дегидратации пленок ДНК наблюдали снижение интенсивности полос, соответствующих деформационным и валентным колебаниям молекулы воды ($3000\text{-}3600 \text{ см}^{-1}$). Таким образом, при снижении влажности пленок наблюдается В-А переход во вторичной структуре ДНК.

Часть исследований проведена с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ "Оптические и лазерные методы исследования вещества".

Литература:

1. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. М. 1987. 584 с.
2. Whelan D.R., Bambery K.R., Heraud P., Tobin M.J., et. al. Monitoring the reversible B to A-like transition of DNA in eukaryotic cells using Fourier transform infrared spectroscopy // *Nucleic Acids Research*. 2011. Vol. 39, № 13. P. 5439–5448.

ПОЛИМЕРНЫЕ ПАВ С ФРАГМЕНТОМ мПЭГ – СОКАТАЛИЗАТОРЫ ОРГАНИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ВОДЕ

Кадников М.В.,
Аспирант 1 года обучения
Физического факультета СПбГУ

Научный руководитель: чл. -корр. РАН, д. ф.
-м. н., профессор,
Цветков Н. В.

Санкт-Петербургский государственный университет
st061237@student.spbu.ru.

Одно из главных направлений Зеленой химии в последнее время – проведение реакций органических веществ в воде, поскольку вода является самым распространенным и безопасным растворителем на нашей планете [1]. Одним из перспективным подходом для осуществления подобных реакции является использование поверхностно-активных веществ, мицеллы которых способны к солюбилизации малорастворимых в воде участников реакции и катализаторов, при этом повышается их локальная концентрация, что может способствовать ускорению протекания реакции. Подобный подход к проведению органических реакции в воде относится к области мицеллярного катализа. Мицеллярный катализ – это явление ускорения химической реакции в присутствии поверхностно-активных веществ за счет локального концентрирования реагентов внутри или на поверхности мицеллы ПАВ.

При использовании низкомолекулярных ПАВ для проведения органических реакций в воде, не всегда удается очистить продукт от ПАВ. Другая проблема состоит в том, что мицеллообразование у низкомолекулярных ПАВ начинается с некоторой критической концентрации, из-за этого необходимо использовать значительные количества катализатора. Переход к использованию полимерных ПАВ в мицеллярном катализе, поможет преодолеть упомянутые недостатки этого метода. Полимерные мицеллярные катализаторы обладают двумя основными преимуществами. Во-первых, их можно легко отделить от реакционной смеси методом диализа. Во-вторых, известно, что полимерные ПАВ способны к солюбилизации и формируют полимерные мицеллы уже при крайне низких концентрациях, что приведет к меньшему расходу катализатора.

Для оценки применимости полимерных веществ в мицеллярном катализе нами были синтезированы гребнеобразные полиэлектролиты, содержащие тетраалкил замещенные аминогруппы, где в качестве одного из заместителей выступали фрагменты мПЭГ разной длины. Были определены гидродинамические и конформационные свойства полученных полимеров. Исследованные полимерные катализаторы демонстрируют значительный ускоряющий эффект в реакциях гидролиза сложного эфира и сочетания Сузуки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 21-73-10132. Авторы выражают благодарность Центру магнитно-резонансных методов исследования вещества, Криогенному отделу, РЦ Методы анализа состава вещества Санкт-Петербургского государственного университета.

Литература:

1. Kitanosono T. et al. Catalytic Organic Reactions in Water toward Sustainable Society // Chem Rev. American Chemical Society, 2018. Vol. 118, № 2. P. 679–746.

© М.В. Кадников, Н.В. Цветков, 2023

АЛГОРИТМ ГРОВЕРА: РЕАЛИЗАЦИЯ НА КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОЙ СИСТЕМАХ

Кузнецова К.Р., Баева А.В., Вашукевич Е.А.

Санкт-Петербургский государственный университет
st088204@student.spbu.ru

Ключевые слова: классический алгоритм поиска, алгоритм Гровера.

Стремительное развитие информационных технологий привело к постоянному росту объёмов данных, которые необходимо передавать, обрабатывать и анализировать [1]. Для этих целей возникает потребность в задействовании больших вычислительных мощностей и разработке специализированных алгоритмов. Одной из актуальных задач, связанных с работой с большими данными, является задача поиска в неупорядоченных базах данных. Она является очень затратной операцией с точки зрения времени и ресурсов для классических компьютеров.

В 1996 году Ловом Гровером был предложен алгоритм [2], основанный на фундаментальных принципах квантовой механики и позволяющий осуществлять поиск элемента в неупорядоченной базе данных более эффективно в сравнении с классическими алгоритмами. Эффективность заключается в том, что для поиска нужного нам элемента p требуется выполнить не $O(N)$ шагов, как в классическом случае, а $O(\sqrt{N})$ шагов, а значит мы получаем квадратичный выигрыш во времени. Несмотря на то, что алгоритм Гровера является принципиально квантовым, позднее было показано, что существуют классические системы [3], для которых действуют алгоритмы, подобные алгоритму квантового поиска.

В данной работе мы рассмотрим систему связанных маятников (Рис.1), в которой действует классический аналог алгоритма Гровера, проанализируем время работы алгоритма. Также мы рассмотрим реальную физическую систему, в которой можно осуществить поиск с помощью квантового алгоритма Гровера.

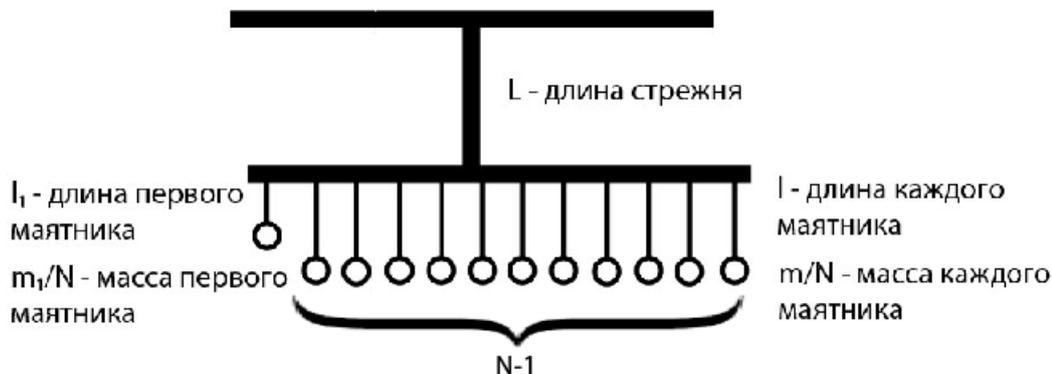


Рис. 1. Рассматриваемая система связанных маятников.

Литература:

1. S. Sagirolu and D. Sinanc, Big data: A review // 2013 International Conference on Collaboration Technologies and Systems (CTS), IEEE. 2013.
2. L. K. Grover, Quantum mechanics helps in searching for needle in a haystack // Phys. Rev. Lett., 1997. vol. 79, pp. 325 328.
3. L. K. Grover and A. M. Sengupta, Classical analog of quantum search // Phys. Rev. A. 2002. vol. 65, p. 032319.

THE REGGEON MODEL WITH POMERON AND ODDERON: RENORMALIZATION GROUP APPROACH

M.A. Braun, M.I. Vyazovsky, E.M. Kuzminskii

St Petersburg University
emkuzminskiy@yandex.com

Keywords: strong interaction, reggeon field theory, perturbative renormalization group

The reggeon field theory describes pomerons and odderons, which appear in QCD as the compound states of gluons, by means of local quantum fields. Our model is introduced by the Lagrangian density

$$L = \sum_{i=1}^2 (\bar{\phi}_i \partial_y \phi_i + \alpha'_i \nabla \bar{\phi}_i \nabla \phi_i) + \frac{i\mu^\varepsilon \lambda_1}{2} (\bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1 \phi_1 + \bar{\phi}_1 \phi_1 \phi_1) + \frac{i\mu^\varepsilon \lambda_2}{2} (2\bar{\phi}_2 \phi_2 \phi_1 + 2\bar{\phi}_2 \bar{\phi}_1 \phi_2) + \frac{i\mu^\varepsilon \lambda_3}{2} (-\bar{\phi}_1 \phi_2 \phi_2 + \bar{\phi}_2 \bar{\phi}_2 \phi_1),$$

where $\phi_1(y, \vec{b}), \phi_2(y, \vec{b})$ – are the complex scalar fields of the pomeron and the odderon, respectively, depending on the rapidity y and the transverse vector \vec{b} of impact parameter, λ_i are the effective coupling constants and μ – renormalization mass, α'_i – Regge trajectory slopes. This model generalizes the Gribov model describing only the pomeron interactions [1,2]. Our model corresponds to the case of the critical pomeron and the Bartels-Lipatov-Vacca odderon [3] with the Regge trajectories $\alpha_p(t) = 1 + \alpha'_1 t$, $\alpha_o(t) = 1 + \alpha'_2 t$. We consider this model in the perturbative renormalization group (RG) and ε -expansion approach in the one-loop approximation. The critical transverse dimension is $D = 4$, so we use dimensional regularization $D = 4 - 2\varepsilon$, extrapolating the final expressions to the physical value $D = 2$.

This model has two crucial features: two independent scale invariances $y \rightarrow ay$ and $\vec{b} \rightarrow c\vec{b}$ and the dependence of the RG equation only on fully invariant combinations – charges, chosen in the form

$$g_1 = \frac{\lambda_1}{8\pi\alpha'_1}, \quad g_2 = \frac{\lambda_2}{8\pi\alpha'_1}, \quad g_3 = \frac{\lambda_3}{8\pi\alpha'_1}, \quad g_4 \equiv u = \frac{\alpha'_2}{\alpha'_1}.$$

here $g_{1,2,3}$ are the small parameters of perturbation theory but g_4 , in general, is not small.

The model is multiplicatively renormalizable in the minimal subtraction (MS) scheme. All beta-functions

$$\begin{aligned} \beta_1 &= -\varepsilon g_1 + 3g_1^3 + \frac{1+u}{2u^2} g_1 g_3^2 - \frac{4}{u^2} g_2 g_3^2, \\ \beta_2 &= -\varepsilon g_2 + \frac{4(3+u)}{(1+u)^2} g_1 g_2^2 + \frac{-1-8u+u^2}{2u^2(1+u)} g_2 g_3^2, \\ \beta_3 &= -\varepsilon g_3 + \frac{8}{1+u} g_1 g_2 g_3 + \frac{8}{u(1+u)^2} g_2^2 g_3 + \frac{-1+u}{2u^2} g_3^3, \\ \beta_4 &= \beta_u = \frac{u}{2} g_1^2 - \frac{8u^2}{(1+u)^3} g_2^2 + \frac{-2+u}{2u} g_3^2 \end{aligned}$$

and all independent anomalous dimensions

$$\gamma_1 = \gamma_{\phi_1} = -\frac{g_1^2}{2} + \frac{g_3^2}{2u^2}, \quad \gamma_2 = \gamma_{\phi_2} = -\frac{4g_2^2}{(1+u)^2}, \quad \gamma_{\alpha'_1} = \frac{g_1^2}{2} + \frac{(u-2)g_3^2}{2u^2}.$$

were calculated in the one-loop approximation. Note that $\alpha'_2 = u\alpha'_1$ is a dependent parameter.

The time-like variable y in the reggeon theory is the rapidity $\log s$ (logarithm of the energy squared), therefore the high energy asymptotics corresponds to infrared (IR) limit $y \rightarrow \infty$. The behaviour of the Green functions is determined by the IR-attractive fixed point of the RG flow. In such a fixed point g_* the asymptotics of the two-point 1-irreducible Green function (that is the inverse propagator) in the (ω, \vec{k}) -representation has the form

$$\Gamma_i(\omega, \vec{k}^2, g, \alpha'_1, \mu) = \omega \left(\frac{\omega}{\alpha'_1 \mu^2} \right)^{-\gamma_i(g_*)} \Phi_i \left(\left(\frac{\omega}{\alpha'_1 \mu^2} \right)^{-z} \frac{\vec{k}^2}{\mu^2}, g_* \right), \quad z = 1 - \frac{\gamma_{\alpha'_1}(g_*)}{2},$$

$i = 1$ for the pomeron and $i = 2$ for the odderon field. Here ω is the variable conjugated to y , \vec{k} is the transverse momentum. The scaling functions Φ_i ($i = 1, 2$) are also calculated in the form of ε -expansions in the one-loop approximation. Then the asymptotical high energy behaviour of the pomeron and the odderon propagators at $\vec{k} = 0$ are derived from the dependence on $y = \log s$ in the y -representation

$$P_p(s) = \text{const} \cdot s (\log s)^{-\gamma_1(g_*)}, \quad P_o(s) = \text{const} \cdot s (\log s)^{-\gamma_2(g_*)}.$$

We find four IR-attractive fixed points:

- 1) $g_*^{(1)} = \left\{ \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{3}}, 0, 0, 0 \right\}$, $P_p(s) \sim s (\ln s)^{\varepsilon/6}$, $P_o(s) \sim s$, $z = 1 - \frac{\varepsilon}{12}$ (also for $g_*^{(2)}$ and $g_*^{(3)}$);
- 2) $g_*^{(2)} = \left\{ \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{3}}, \frac{233\sqrt{3} + 117\sqrt{11}}{96(\sqrt{33} + 15)}\sqrt{\varepsilon}, 0, \frac{3}{16}(\sqrt{33} - 1) \right\}$, $P_p(s) \sim s (\ln s)^{\varepsilon/6}$, $P_o(s) \sim s (\ln s)^{\varepsilon/5.649}$;
- 3) $g_*^{(3)} = \left\{ \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{3}}, \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{48}}, 0, 0 \right\}$ with $\frac{g_3}{g_4} = 0$, $P_p(s) \sim s (\ln s)^{\varepsilon/6}$, $P_o(s) \sim s (\ln s)^{\varepsilon/12}$;
- 4) $g_*^{(4)} = \{0, 0, 2\sqrt{2\varepsilon}, 2\}$, $P_p(s) \sim s (\ln s)^{-\varepsilon}$, $P_o(s) \sim s$, $z = 1$.

For the physical quantities one has to set $\varepsilon = 1$. We also find three continuous rays of fixed points but all of them are IR-repulsive.

Despite all the beta-functions being calculated, RG flow equations are too complicated to determine the RG trajectory analytically. The numerical analysis of it was performed: 1290 initial points were taken from intervals $[0, 1]$ in $g_{1,2,3}$ and $[0, 2]$ in g_4 with the step 0.2. In 736 cases the trajectory goes to infinity and in the other 554 cases the trajectory goes into one of the fixed points $g_*^{(1)}, g_*^{(3)}, g_*^{(4)}$. Trajectories ending in fixed point $g_*^{(2)}$ were not found. The explicit behaviour of the trajectories with the change of initial conditions is rather unpredictable.

The main conclusion is that the asymptotic of the propagators is qualitatively the same as in the theory without odderon [4], that is modulated by the logarithms of energy in certain powers of order unity. It corresponds to the cross-sections logarithmically growing or decreasing at high energies.

References:

1. V.N. Gribov, Sov. Phys. JETP 26 (1968) 414.
2. A.A. Migdal, A.M. Polyakov, K.A. Ter-Martirosyan, Phys. Lett. 48 B (1974) 239.
3. J. Bartels, L.N. Lipatov and G.P. Vacca, Phys. Lett. B 477 (2000) 178.
4. H.D.I. Abarbanel, J.B. Bronzan, Phys. Rev. D 9 (1974) 2397.

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$

Максимов М.А.,
Студент 3 года обучения,
физический факультет

Научный руководитель: Капитонов Ю.В.,
к.ф.-м.н., доцент, кафедра фотоники,
лаборатория кристаллофотоники

Санкт-Петербургский Государственный Университет (СПбГУ)
m.maksimov@spbu.ru

На сегодняшний день галогенидные перовскиты и их низкоразмерные аналоги являются перспективными полупроводниковыми материалами для создания солнечных элементов, светодиодов, лазеров, детекторов, и иных оптических устройств. [1]

В настоящей работе исследуется фотолюминесценция как метод спектроскопии дефектов в кристаллах галогенидных перовскитов MAPbCl_3 ($\text{MA}^+ = \text{CH}_3\text{NH}_3^+$) при температуре $T = 4\text{K}$ и оптической накачке пикосекундным импульсным лазером. ходе работы выращиваются кристаллы MAPbCl_3 методом AVC (Antisolvent Vapor-assisted Crystallization) в стандартных пропорциях 1:1 ($\text{MACl}:\text{PbCl}_2$), а также с добавлением HCl для встраивания избыточных ионов Cl^- в кристаллы. Для характеристики базовых структурных свойств проводится рентгеновская порошковая дифракция (PXRD).

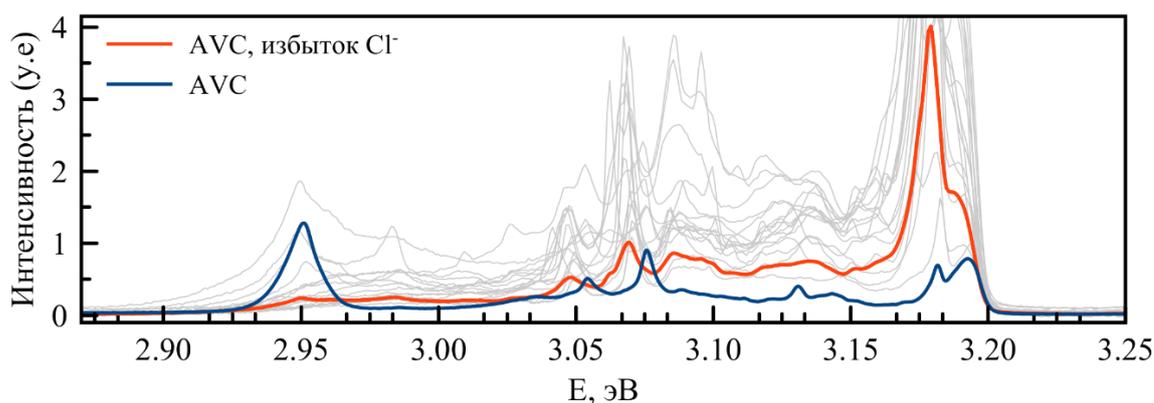


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции для кристаллов MAPbCl_3 с избытком хлора, и без него.

Полученные экспериментальные результаты указывают на возможность определения структурных дефектов в кристаллах MAPbCl_3 по изменению характерных особенностей на спектрах фотолюминесценции.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Мегагрант № 075-15-2022-1112) на оборудовании ресурсного центра СПбГУ "Нанопотоника" и ресурсного центра «Рентгенодифракционные методы исследования».

Литература:

1. Murzin, A.O., et al. Diffuse Reflectance Spectroscopy with Dilution: A Powerful Method for Halide Perovskites Study // *Molecules* 2023, 28, 350.

ОБЩИЕ СВОЙСТВА УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ СИММЕТРИЧНЫХ ТЕЛЕПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ТЕОРИЙ

Максютов Р.И.,
Магистрант 1 года обучения
Кафедры ФВЭиЭЧ, СПбГУ

Научный руководитель:
Андронов Е.В., к.ф.-м.н.,
доцент кафедры ФВЭиЭЧ, СПбГУ

Санкт-Петербургский Государственный Университет
RamazanMaksyutov@yandex.ru

Практическая значимость: существование ряда явлений и объектов, не нашедших объяснения в рамках общей теории относительности: тёмная материя, тёмная энергия; а также отсутствие полного описания внутреннего строения чёрных дыр и квантовой теории гравитации.

Теоретическая значимость: класс симметричных телепараллельных теорий гравитации требует более тщательной разработки, а также выяснения природы используемых в ней математических объектов и свойств уравнений движения.

Проблема исследования: описание общих свойств уравнений движения в классе симметричных телепараллельных теорий гравитации и иллюстрация данных свойств на конкретных примерах.

Данное исследование основывается на подходах и методах, представленных в работах [1]-[4]. Авторы данных работ рассматривают общий формализм симметричных телепараллельных теорий гравитации и конкретные его приложения к космологическим моделям. Среди знаний и методов, необходимых для проведения данного исследования, можно выделить основы вариационного исчисления, тензорного анализа, дифференциальной геометрии и космологии.

Во-первых, была воспроизведена и уточнена процедура получения уравнений движения в классе симметричных телепараллельных теорий гравитации, приведённая в литературе [3]. Во-вторых, были описаны основные свойства данных уравнений движения в наиболее важных частных случаях. В-третьих, данные свойства были проиллюстрированы на примере пространственно плоской, однородной и изотропной Вселенной. Наконец, было выяснено, что вспомогательные поля в ковариантной формулировке данных теорий должны рассматриваться как скаляры.

Результаты, полученные в ходе проведённого исследования, дают основу для дальнейшего изучения класса симметричных телепараллельных теорий гравитации, в частности для проведения полного гамильтонова анализа данных теорий и исследования приложений данного формализма к более сложным космологическим моделям. Кроме того, класс $f(Q)$ -модификаций теории гравитации открывает достаточно широкие возможности для дальнейшего моделирования процессов, происходивших на ранних этапах существования Вселенной.

Литература:

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

ФОТОСТИМУЛИРОВАННОЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В ГАЛОГЕНИДНЫХ ПЕРОВСКИТАХ

Мартынович М.Д.,
Магистрант 2 года обучения
Физического Факультета СПбГУ

Научный руководитель:
Емелин А.В. д.ф.-м.н.,
Профессор, кафедра Фотоники
Физический факультет

Санкт-Петербургский государственный университет
St068838@student.spbu.ru

Работа посвящена исследованию фотостимулированного дефектообразования в номинально чистом перовските MAPbBr_3 , а также в MAPbBr_3 допированном висмутом и серебром ($\text{MAPb}(\text{Bi})\text{Br}_3$ и $\text{MAPb}(\text{Ag})\text{Br}_3$). Исследование проводилось методом спектроскопии диффузного отражения. В ходе работы с помощью спектрофотометра с интегрирующей сферой были измерены спектры диффузного отражения порошкообразных образцов чистого MAPbBr_3 , а также допированного серебром MAPbBr_3 и допированного висмутом MAPbBr_3 , до и после облучения ртутной лампой в видимом диапазоне длин волн. В дальнейшем эти спектры были пересчитаны в спектры поглощения. Построены разностные спектры, соответствующие поглощению дефектов, и кинетические кривые, выражающие зависимость изменения поглощения от времени облучения. Также в работе проведено сравнение спектров поглощения дефектов и кинетических кривых для MAPbBr_3 и CsPbBr_3 , на основании которого сделаны следующие выводы:

1. Все исследуемые перовскиты характеризуются фотостимулированным дефектообразованием.
2. Кинетика дефектообразования в исследуемых образцах указывает на то, что перовскиты MAPbBr_3 и $\text{MAPb}(\text{Bi})\text{Br}_3$ являются фотоустойчивыми материалами, а $\text{MAPb}(\text{Ag})\text{Br}_3$ – фоточувствительным материалом.
3. Сравнение с дефектообразованием в CsPbBr_3 позволяет предположить, что наблюдаемые дефекты представляют собой межузельные состояния брома.

© М.Д. Мартынович, А.В. Емелин, 2023

ОБНАРУЖЕНИЕ СТАБИЛИЗИРУЮЩИХ ОБОЛОЧЕЧНЫХ ЭФФЕКТОВ В СВЕРХТЯЖЁЛЫХ НУКЛИДАХ МЕТОДОМ ПРЕЦИЗИОННОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Нечипоренко Ю. В.^{1,2}

Аспирант 4 года обучения
физический факультет, кафедра ЯФМИ

Научный руководитель:
Новиков Ю. Н.^{1,2} д. ф.- м. н.,
Профессор, кафедра ЯФМИ

*Санкт-Петербургский государственный университет
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский
институт»
yurichnt@bk.ru*

Известно, что заполненные ядерные оболочки повышают стабильность нуклидов. Для сверхтяжелых нуклидов существование острова стабильности предсказывается вблизи заполненных оболочек протонов $Z = 114-120$ и нейтронов $N = 184$ [1]. Точное расположение центра и протяженность этого острова остаются неопределенными. С помощью высокоточной масс-спектрометрия можно напрямую измерять энергии связи (массы) нуклидов и, таким образом, обнаружить наличие оболочечных эффектов.

Наиболее точным инструментом для измерения масс сверхтяжелых нуклидов являются ловушки Пеннинга. Самым современным методом измерения масс в ловушках является метод фазового отображения ионного циклотронного резонанса (PI-ICR) для определения циклотронной частоты изучаемого иона, которая напрямую зависит от массы и его заряда [2].

При построении ландшафта масс можно воспользоваться тем, что для получения масс всех участников альфа-цепочки достаточно измерить массу одного нуклида из этой цепочки и восстановить массы остальных членов по известным энергиям альфа-распада. Следует отметить, что область нейтродефицитных сверхтяжелых нуклидов изобилует альфа-излучателями, связанными в различные цепочки распадов. Полученный ландшафт измеренных масс нуклидов позволил обнаружить эффекты, связанные с заполнением промежуточных оболочек.

В докладе будет показано наличие оболочечных щелей, приводящих к стабилизирующим эффектам свойств нуклидов при числе нейтронов $N = 152$ и $N = 162$ в области сверхтяжелых элементов.

Литература:

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.

© Ю.В. Нечипоренко, Ю.Н. Новиков, 2023

ВЛИЯНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫЙ СИНТЕЗ ПРОВОДЯЩИХ СТРУКТУР

Нинаян Р.Г.¹, Левшакова А.С.¹, Хайрулина Е.М.¹, Шишов А.Ю.¹, Маньшина А.А.¹.
Студент, 3 курс бакалавриата

Санкт-Петербургский государственный университет
st098468@student.spbu.ru

Ключевые слова: глубокие эвтектические растворители, лазерный синтез, оптические свойства, металлизация.

Развитие науки во многом зависит от создания инновационных технологий металлизации различных типов диэлектрических и полупроводниковых поверхностей, что необходимо для производства печатных плат, создания гибкой электроники и др. [1]. Для достижения этой цели обычно используется литография, однако данный метод является многоэтапным и крайне неэкологичным [2]. Поэтому внимание исследователей привлекает разработка более простых и одноэтапных методов металлизации. Эффективным способом металлизации диэлектрических поверхностей является лазерно-индуцированное осаждение металлов из раствора (LCLD). В процессе LCLD лазерный луч фокусируется на границе раствор металла-подложка, при этом в растворе металла происходит окислительно-восстановительная реакция, в результате которой на подложку осаждаются нано- и микроразмерные металлические структуры. Однако скорость осаждения из водных или спиртовых растворов, обычно использующихся в данном методе, мешает эффективному использованию применению LCLD, поскольку она составляет около 0,01 мм в секунду. Для решения этой проблемы в недавних исследованиях нашей научной группы было предложено использовать в качестве среды для осаждения глубокие эвтектические растворители (ГЭР), которые, как было показано, ускоряют процесс лазерного осаждения более чем на два порядка [3]. ГЭРы представляют собой эвтектическую смесь донора протонов (органические кислоты и сахара) и акцептора протонов (холин хлорид). В качестве источника металла выступает соль соответствующего металла.

В данной работе была выполнена оптимизация физико-химических факторов, влияющих на процесс формирования микропаттернов металлов. Полученные результаты свидетельствуют о том, что для эффективного изготовления проводящих структур на поверхностях диэлектриков можно использовать системы ГЭР, состоящие из холин хлорида, ацетата меди и органических кислот. Далее были изучены оптические свойства (ИК-спектроскопия и показатель преломления) (рис. 1) шести ГЭР, содержащих холин хлорид и карбоновую кислоту (лимонную, винную, яблочную, гликолевую, малоновую и молочную) с содержанием воды 0-50 мас. %.

Обнаружено, что все изученные свойства изменяются постепенно, без скачков, что может свидетельствовать о постепенном включении воды в структуру ГЭР путем образования водородных связей без их разрушения. Это позволяет тонко настраивать свойства ГЭР, делая их пригодными для различных применений. Кроме того, впервые обнаружена возможность разделения этих эвтектических растворителей на подклассы в зависимости от количества функциональных групп. К первой группе относятся ГЭР на основе лимонной, винной и яблочной кислот, а ко второй - на основе малоновой, молочной и гликолевой кислот. Такое разделение становится возможным как на основании реологических свойств, так и по результатам определения показателя преломления [4]. Наилучшие результаты лазерного осаждения были получены при использовании ГЭР, содержащих винную или лимонную кислоту.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 23-73-00060).

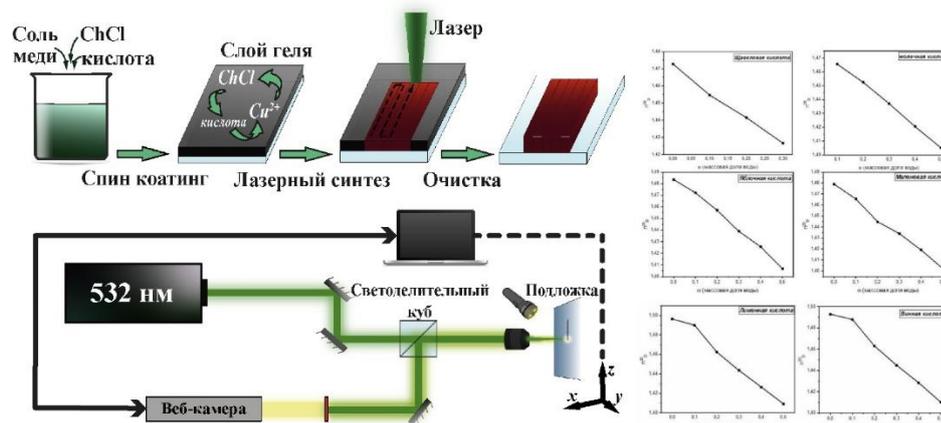


Рис. 1. Схема процесса лазерного синтеза; схема установки для проведения лазерного синтеза; Зависимость показателя преломления ГЭР от массовой доли воды в системе, для ГЭР, содержащих различные органические кислоты.

Благодарность выражается:

- *Российскому научному фонду за предоставленную помощь (грант 23-73-00060);*
- *научному центру СПбГУ диагностики функциональных материалов для медицины;*
- *центру оптических и лазерных исследований материалов;*
- *научному Центру ИТМО Core Facility "Нанотехнологии".*

Литература:

1. Zhang, J. et al. Laser-Induced Selective Metallization on Polymer Substrates Using Organocopper for Portable Electronics. ACS Appl. Mater. Interfaces 11, 2019.
2. Koritsoglou, O. et al. Copper micro-electrode fabrication using laser printing and laser sintering processes for on-chip antennas on flexible integrated circuits. Opt. Mater. Express 9, 2019.
3. Shishov, A., Gordeychuk, D., Logunov, L. & Tumkin, I. High rate laser deposition of conductive copper microstructures from deep eutectic solvents. Chem. Commun. 55, 2019.3.
4. Ninayan R. et al. Water-induced changes in choline chloride-carboxylic acid deep eutectic solvents properties // Colloids Surf A Physicochem Eng Asp. 2023. Vol. 679. P. 132543.

© Р.Г. Нинаян, А.С. Левшакова, Е.М. Хайрулина, А.Ю. Шишов, А.А Маньшина.

СРАВНЕНИЕ ПРОТОКОЛОВ ТЕЛЕПОРТАЦИИ В НЕПРЕРЫВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ С НЕГАУССОВЫМ РЕСУРСОМ

Нургеева А.Э., Зинатуллин Э.Р., Голубева Т.Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет
st076854@student.spbu.ru

Одной из перспективных моделей универсальных квантовых вычислений является модель однонаправленных квантовых вычислений в непрерывных переменных. В ее основе лежит один из базовых протоколов квантовой обработки информации – протокол квантовой телепортации. В качестве ресурса для телепортации обычно выступают сжатые состояния. Однако, в силу конечности степени сжатия ресурсных состояний, состояние на выходе протокола будет содержать в себе некоторую ошибку. Этот недостаток наследует и модель однонаправленных вычислений. Экспериментально достижимого на данный момент сжатия оказывается недостаточно для достижения отказоустойчивых квантовых вычислений. Таким образом, выявление методов уменьшения требования к сжатию ресурсных состояний для схем вычислений в рассматриваемой модели является перспективной задачей, и первый шаг на пути к этому – анализ протокола телепортации.

В данной работе мы исследовали возможные способы уменьшения ошибки телепортации за счет использования негауссовых состояний как ресурса для вычислений. Мы подробно рассмотрели работу трех протоколов квантовой телепортации в непрерывных переменных: оригинального протокола [1] и две его модификации с использованием негауссовых операций – протокол с использованием идеальной процедуры вычитания фотона [2] и протокол с кубическим фазовым затвором [3]. Затем мы сравнили эффективность работы всех трех протоколов посредством оценки величины верности (см. Рис. 1).

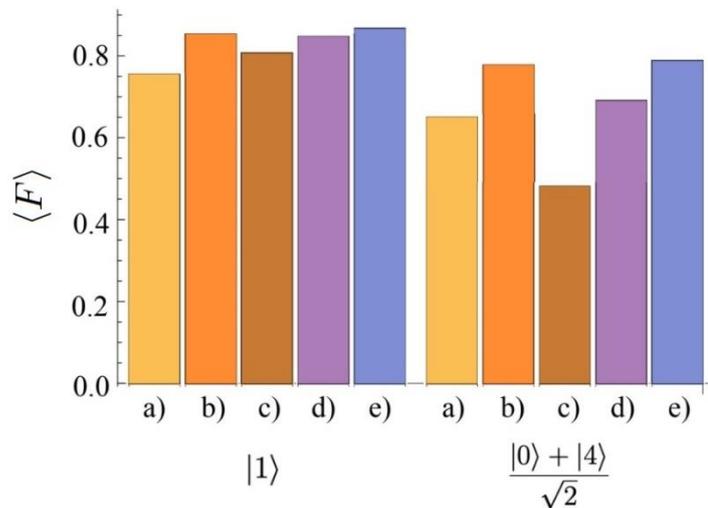


Рис. 1: Среднее значение верности (а) оригинального протокола, (b) протокола с идеальным вычитанием фотонов и протокола с использованием кубического фазового затвора при (c) $\alpha = 8$; (d) 15; (e) 30 для фоковского и биномиального состояний.

Численные расчеты показали, что обе модификации дают сопоставимое улучшение верности телепортации по сравнению с оригинальным протоколом. Тем не менее каждый из протоколов обладает своими особенностями. В протоколе с идеальной процедурой вычитания фотонов нет каких-либо управляющих параметров, которые могут влиять на качество телепортации. В то же время, для протокола с кубическим фазовым затвором в качестве такого параметра выступает сдвиг α ресурсного осциллятора перед негауссовой операцией. Мы исследовали зависимость верности телепортации от параметра сдвига вспомогательного осциллятора и показали, что, увеличивая α , мы можем улучшить качество телепортации. Это позволяет протоколу с кубическим фазовым затвором при некоторых значениях параметра α обойти по качеству протокол с идеальным вычитанием фотонов.

Литература:

1. Braunstein S. L., Kimble H. J. Teleportation of continuous quantum variables // Physical Review Letters. 1998. Т. 80, No 4. с. 869.
2. Opatrny' T., Kurizki G., Welsch D-G. Improvement on teleportation of continuous variables by photon subtraction via conditional measurement // Physical Review A. 2000. Т. 61, No 3. с. 032302.
3. Zinatullin E. R., Korolev S. B., Golubeva T. Y. Teleportation protocols with non-Gaussian operations: Conditional photon subtraction versus cubic phase gate //Physical Review A. 2023. Т. 107., No. 2. с. 022422.

© Нурегеева А.Э., Зинатуллин Э.Р., Голубева Т.Ю.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ В СИСТЕМЕ НЕФТЬ-ВОДА ФОТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Петрова М.С.,¹ Гончаров В.В.,¹

Семенов А.В.,¹ Домарева Н.П.¹

1- Магистрант 2 года обучения
мегафакультет наук о жизни, НИУ «ИТМО»

Научный руководитель:

Масалович М.С., к.х.н., доцент
мегафакультет наук о жизни, НИУ «ИТМО»

НИУ «ИТМО»
mary1349@mail.ru

Ключевые слова: ингибитор коррозии, нефть, коэффициент распределения, спектрофотометрия, бензотриазол, пластовая вода.

Активно развивающаяся автоматизация процессов добычи нефти требует внедрения современных решений на производства. Существует задача контроля коррозии нефтяных труб для избежания выхода из строя дорогостоящего оборудования хранения и транспортировки смесей и предотвращения нефтеразливов в водоемы [1]. С этой целью на месторождениях используют ингибиторы коррозии, дозированно вводимые в систему. Для контроля их содержания в поточном режиме нами разрабатывается анализатор, способный в режиме реального времени детектировать концентрацию ингибиторов.

Принцип работы устройства основан на анализе электрохимических характеристик образцов пластовой воды, попутно добываемой с нефтью. Для этого в измерительную кассету с ячейками помещаются медные печатные электроды, с помощью которых собирается датасет вольтамперных кривых. Анализ пиков окисления и восстановления невозможно провести визуально, поэтому база данных обрабатывается методами машинного обучения. Однако в силу сложного состава водонефтяного флюида, существует необходимость пробоподготовки: для этого флюид должен разделяться на водную и нефтяную фазу. Поэтому необходимо с высокой точностью знать количество ингибитора, находящееся в водной и в нефтяной фазе. По этой причине мы произвели расчет «коэффициента распределения».

В основе нахождения коэффициента распределения ингибиторов коррозии лежит экстракционно-фотометрический метод, применение которого для данной сферы впервые описано в работе [2], и который, в настоящее время, в тех или иных модификациях используется в лабораториях нефтедобывающих компаний. В качестве прибора для регистрации оптической плотности использовался UV-VIS спектрометр модели SHIMADZU UV-1800, который использовался в режиме фотометра на фиксированной длине волны. Анализы проводились в соответствии с экстракционно-фотометрической методикой [3]. Калибровка осуществлялась по стандартным растворам ингибитора коррозии бензотриазола с начальными концентрациями 0, 10, 50 и 100 г/м³.

Кислотный экстракт отбирается в кварцевую кювету и помещается в спектрофотометр. Оптическая плотность измеряется в диапазоне длин волн от 200 до 600 нм. Спектрофотометрические зависимости для бензотриазола представлена на рисунке 1. По каждому спектру была вычислена концентрация соответствующего ИК в нефтяной фазе по формуле (1):

$$C_{\text{нефть}} = \frac{C_{\text{смесь}} V_{\text{смесь}} - C_{\text{вода}} V_{\text{вода}}}{V_{\text{нефть}}} \quad (1)$$

Далее был рассчитан коэффициент распределения Р (формула 2):

$$P = \frac{C_{\text{вода}}}{C_{\text{нефть}}} \quad (2)$$

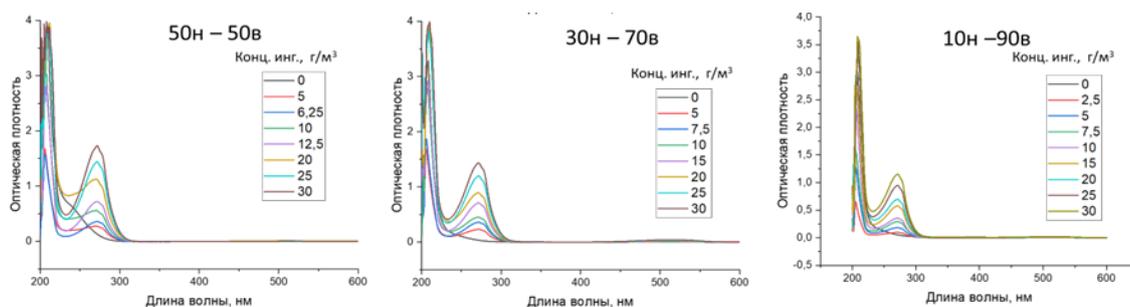


Рисунок 1 – Оптические спектры для бензотриазола в различных смесях нефть-вода при различных концентрациях

Экспериментально найдены коэффициенты распределения ингибитора коррозии бензотриазола в модельной системе гексан-вода с обводненностью 50%. Получены табличные значения (таблица 1) коэффициента распределения по экспериментальным данным в модельной системе нефть-вода с обводненностью нефти от 10 до 90% при комнатной температуре и при 60 °С.

Соотношение нефть:вода	Бензотриазол
90:10	1,115885
80:20	1,454198
70:30	0,942714
60:40	1,23114
50:50	1,898253

Таблица 1 – Коэффициент распределения бензотриазола

В результате работы экспериментально было показано, что значения коэффициента распределения зависят от температуры, обводненности нефти, диэлектрической проницаемости нефти. При увеличении температуры коэффициент распределения P уменьшается.

Литература:

1. Pekdemir T. et al. Demulsification of highly stable water-in-oil emulsions //Separation science and technology. – 2003. – Т. 38. – №. 5. – С. 1161-1183.
2. Doležal D., Bolanca T., Stefanović Š. C. Development of UV/VIS spectrometric methodology for corrosion inhibitor residuals monitoring in oilfield brine //Materialwissenschaft und Werkstofftechnik. – 2011. – Т. 42. – №. 3. – С. 229-233.
3. Khanafer M., Shirmohammadi S. Applied AI in instrumentation and measurement: The deep learning revolution //IEEE Instrumentation & Measurement Magazine. – 2020. – Т. 23. – №. 6. – С. 10-17.

ИЗУЧЕНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ ГЕНЕРАТОРА EPOS4 НА ПРИМЕРЕ ГЕНЕРАЦИИ PP-СТОЛКНОВЕНИЙ С ЭНЕРГИЕЙ 7TeV

Размыслов К.В.

Санкт-Петербургский государственный университет
st097914@student.spbu.ru

В физике высоких и сверхвысоких энергий важную роль играют алгоритмы, численно моделирующие события столкновений частиц – генераторы событий. Мы провели моделирование pp столкновений средствами генератора EPOS4 [1], [2].

Проверено распределение по множественности в различных диапазонах псевдобыстрот, результаты оказались близки к экспериментальным (ALICE Collaboration [3]).

Подтверждена аксиальная симметрия распределения итоговых частиц.

Обнаружены проблемы с сохранением энергии и барионного заряда:

- Выявлено существенное нарушение сохранения барионного заряда (разброс значений до ± 6 от начального значения $+2$).
- Выявлено нарушение сохранения энергии (разброс около пика 7 TeV порядка 0.3% и наличие редких выбросов порядка 1.5%).

При параллельном моделировании одиночных событий было выявлено, что EPOS4 отбрасывает порядка 50% попыток моделирования событий.

Обнаружено, что при различных форматах вывода EPOS4 записывает в файлы одни и те же данные с разной точностью.

Для большинства сгенерированных событий все проверенные нами законы сохранения выполняются. Причиной нарушения законов сохранения, по-видимому, является неустойчивость алгоритмов из-за потери точности при вычислениях в формате с плавающей точкой.

Таким образом, для корректного применения результатов моделирования событий генератором EPOS4 необходимо проводить дополнительную фильтрацию событий.

Литература:

1. EPOS4: A Monte Carlo tool for simulating high-energy scatterings, <https://klaus.pages.in2p3.fr/epos4/>.
2. Gustafson, G. Event generators for heavy-ion physics, recent developments. In: Sixth Annual Conference on Large Hadron Collider Physics. 4-9 June 2018. Bologna, pp. 215-220.
3. Adam J., et al. (ALICE Collaboration). Charged-particle multiplicities in proton–proton collisions at $\sqrt{s} = 0.9$ to 8 TeV. The European Physical Journal C, 2017, 77, pp. 1-39.

© К.В. Размыслов, 2023

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПОЛОС Ph_3PO В СПЕКТРЕ ПОГЛОЩЕНИЯ

Рубцова А.К.,
Бакалавр 3 года обучения
Физический факультет

Сюй Л.
Магистр 2 года обучения
Физический факультет

Научный руководитель:
Асфин Р.Е., к. ф. -м. н.,
доцент, кафедра молекулярной
спектроскопии, Санкт-Петербургский
государственный
университет

Санкт-Петербургский государственный университет
st097941@student.spbu.ru

Коэффициент поглощения является фундаментальной величиной, которая имеет как теоретическое, так и практическое значение.

В теоретических исследованиях его изучение позволяет оценить эффективность различных методов расчета и предсказания спектральных характеристик вещества. Изучение соответствия между расчетными и экспериментальными значениями коэффициента поглощения позволяет оценить точность и применимость теоретических подходов.

С практической точки зрения, измерение коэффициента поглощения позволяет определить концентрацию вещества в образце.

Из закона Бугера-Ламберта-Бера ясно, что если знать длину оптического пути, интенсивность и концентрацию вещества, можно рассчитать коэффициент поглощения колебательной полосы.

В данной работе были исследованы колебательные полосы для трифенилфосфин оксида, растворенного в CCl_4 при различных концентрациях. Спектры были зарегистрированы при помощи инфракрасного Фурье-спектрометра Nicolet 6700 в стандартной жидкостной кювете с оптической длиной 1.03 мм в диапазоне $4000 - 400 \text{ см}^{-1}$. Всего было зарегистрировано 10 спектров при концентрации $1.84 - 4.84 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Полосы в спектре были отождествлены в работах [1, 2].

С помощью программного пакета Origin была получена аппроксимация для выбранных полос поглощения Ph_3PO . Полосы были аппроксимированы профилем Фойгта или профилем Лоренца. Выбиралась аппроксимация, которая давала наименьшую погрешность. Вычислив площадь под графиками, как сумму площадей контуров аппроксимирующих пиков, можно рассчитать коэффициенты поглощения и их погрешность. Таким образом, было рассмотрено 9 полос в 10 спектрах трифенилфосфин оксида при различных концентрациях. Итоговые значения коэффициентов поглощения были рассчитаны как массовзвешанное среднее.

Было замечено, что погрешность полученных значений для пиков слабой интенсивности больше. Но, тем не менее, погрешность итоговых значений получилась приемлемой для всех полос. Также полученные результаты хорошо соотносятся с интенсивностями обрабатываемых пиков.

Благодарности. Спектры были зарегистрированы на оборудовании РЦ "Геомодель" научного парка СПбГУ. Данная работа поддержана Санкт-Петербургским государственным университетом (проект No. 95439487).

Литература:

1. Deacon G. B. Green J. H. S. Vibrational spectra of ligands and complexes-II. Infra-red spectra ($3650-375 \text{ см}^{-1}$) of triphenylphosphine, triphenylphosphine oxide, and their complexes. // Spectrochimica Acta. 1968. № 24A P. 845 – 852

2. Whiffen D. H. Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Fluoro-, Chloro-, Bromo-, and Iodo-benzene.// Journal of the Chemical Society. 1956, P. 1350 –1356.

© А.К. Рубцова, Л. Сюй, Р.Е. Асфин, 2023

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ КОМПЛЕКСА НМРА...ТФЕ

С. Лухан

Санкт-Петербургский государственный университет
st067893@student.spbu.ru

Ключевые слова: ИК-Фурье спектроскопия, водородная связь, НМРА, ТФЕ

ИК-Фурье спектроскопия, как мощный инструмент для биологического и химического анализа, широко используется в научных исследованиях и промышленности и стала важным аналитическим инструментом в области научных исследований, производства и испытания товаров. Величина частоты колебаний каждой группы в инфракрасных спектрах поглощения в основном определяется константами химической связи и массами атомов, соединенных по обоим концам связи. Однако, поскольку колебания каждой группы в молекуле не изолированы и зависят не только от соседних групп и других частей молекулы, т.е. от внутренней структуры молекулы, но и от внешних факторов, таких как растворители, условия измерения и физическое состояние образцов, положения пиков различных соединений, содержащих одну и ту же функциональную группу, или одного и того же соединения в различных внешних условиях отличаются. Одним из внутренних факторов, влияющих на изменение положения пиков, является водородная связь. Образование водородной связи, межмолекулярной или внутримолекулярной, приводит к уменьшению исходных констант сил химической связи, участвующих в образовании водородной связи, и частота поглощения смещается в сторону низкого волнового числа; в ИК спектре водородной связи существует множество характерных пиков, которые связаны с типом и прочностью водородной связи. Положение и форма этих пиков могут быть использованы для определения типа и прочности связи.[1][3]

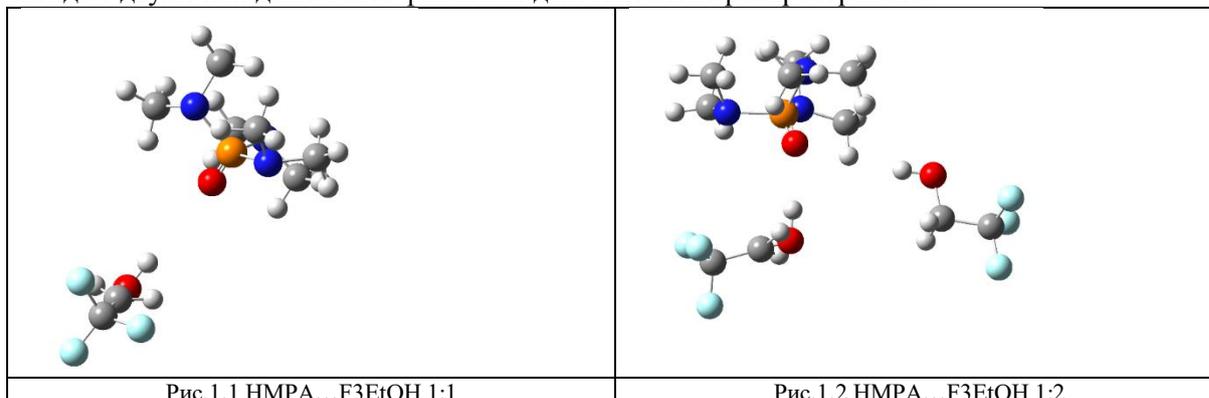
В данном эксперименте мы исследовали, могут ли Фосфин оксиды, содержащие двойные связи РО, образовывать водородные связи с ОН, а также существование комплекса фосфин оксид – спирт 1:2. [2].

Спектры были зарегистрированы с помощью ИК Фурье-спектрометра Nicolet 6700 в интервале $4000 - 400 \text{ см}^{-1}$ с разрешением 1 см^{-1} в кюветах различной толщины (1.03 и 0.544 мм). Смеси гексаметилфосфортриамида (НМРА) и 2,2,2-трифторэтанола (ТФЕ) растворялись в CCl_4 при соотношениях концентраций НМРА...ТФЕ от 1:8 до 8:1.

После получения спектров смесей с различным соотношением концентраций методом дифференциальной спектроскопии мономеров CCl_4 , НМРА и ТФЕ были получены спектры различных комплексов. Концентрационный анализ показал, что это комплексы НМРА...ТФЕ 1:1 и 1:2 (Рис. 1.1 и 1.2).

На Рис. 2 показаны спектры в области валентных колебаний $\nu(\text{OH})$ комплекса и ТФЕ, широкие интенсивные полосы в диапазоне $3100-3500 \text{ см}^{-1}$, говорят об образовании комплексов с водородными связями.

На Рис. 3 показаны полосы валентного колебания группы $\text{P}=\text{O}$, вовлеченной в водородную связь в спектрах комплексов НМРА...ТФЕ 1:1 и 1:2. Затем будут опробованы различные фосфин оксиды и различные фенолы, чтобы экспериментально доказать, что такое сочетание одного фосфин оксида с двумя или даже более фенолами действительно распространено.



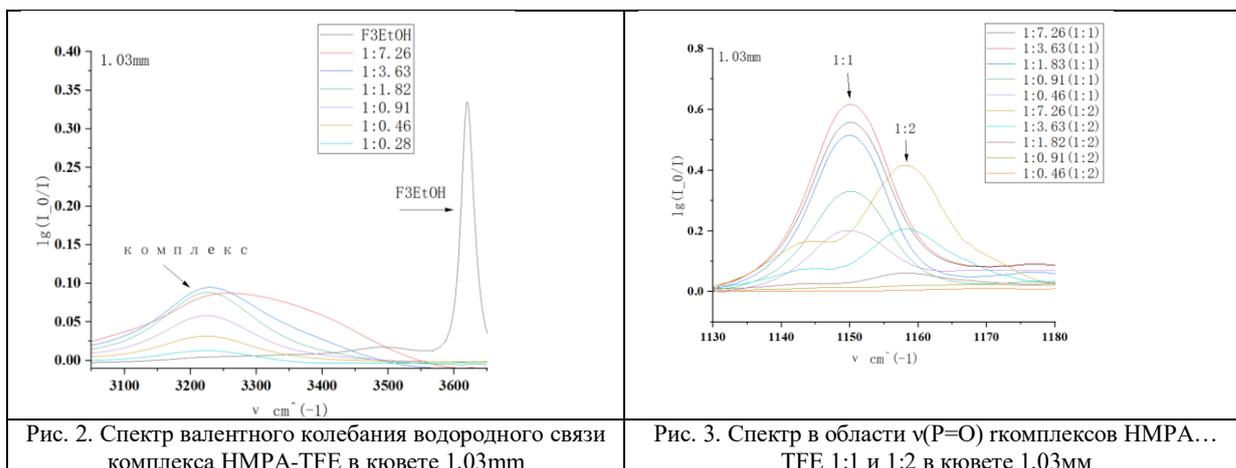


Рис. 2. Спектр валентного колебания водородного связи комплекса НМРА-ТФЕ в кювете 1.03мм

Рис. 3. Спектр в области $\nu(\text{P}=\text{O})$ гкомплексов НМРА... ТФЕ 1:1 и 1:2 в кювете 1.03мм

Данная работа хорошо объясняет химические и физические свойства координации фосфин оксида и фенола, причем такая водородная связь имеет сходство с фосфонатной диэфирной связью, что также может оказать серьезную помощь в биологии.

Спектры были зарегистрированы на оборудовании РЦ "Геомодель" научного парка СПбГУ. Данная работа поддержана Санкт-Петербургским государственным университетом (проект No. 95439487).

Литература:

1. Тохадзе, К.Г., Асфин Р.Е., Тохадзе И.К. Спектроскопия молекулярных комплексов.- СПб : Изд-во СПбГУ, 2019, -188с.
2. Asfin R.E., Bulychev V.P., Buturlimova M.V., Tokhadze K.G. Theoretical and matrix isolation studies of infrared spectra of the $\text{H}_2\text{CO}\cdots\text{HF}$ hydrogen-bonded complex // Journal of Molecular Structure 1225 (2021) 129080
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопии. Изд.2-е. – М. : Эдиториал УРСС, 2001, - 896 с. ISBN 5-8360-0177-4.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЫЧЬЕГО СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА С ОДНОВАЛЕНТНЫМИ ИОНАМИ МЕТАЛЛОВ

Федотова Е. В., Пастон С. В

Санкт-Петербургский государственный университет
st077318@student.spbu.ru

Ключевые слова: сывороточный альбумин, одновалентные ионы металлов, комплексообразование, гидратация, ИК Фурье спектроскопия, собственная флуоресценция белка.

Сывороточный альбумин (СА) – наиболее распространенный водорастворимый белок в организме млекопитающих, составляющий около 60% белков плазмы крови. Он является главным транспортировщиком множества низкомолекулярных лигандов, в том числе жирных кислот и лекарственных препаратов, а также регулятором осмотического давления крови. Благодаря высокой доступности этот белок подробно изучен и широко используется для исследований как модельный глобулярный белок [1]. В последнее время ведутся разработки средств доставки лекарственных и диагностических агентов с использованием молекулы СА [2]. В этой связи необходимо понимать структурные особенности СА при варьировании условий среды (полярности, ионной силы, pH, температуры), чтобы использовать эти физико-химические параметры для направленного изменения структуры белка в процессе конструирования терапевтического комплекса.

В данной работе изучается структура бычьего сывороточного альбумина (БСА) в растворах и влажных пленках при варьировании концентрации хлоридов щелочных металлов. В нейтральном водном растворе поверхностный заряд молекулы БСА $-17e$ [1]. С ростом концентрации соли в растворе наблюдается снижение модуля заряда белковых частиц. Изменения в третичной структуре СА наблюдаются с помощью спектроскопии поглощения и флуоресценции белка в УФ диапазоне. В этой области спектра хромофорами являются ароматические аминокислотные остатки (Tyr и Trp), расположенные внутри белковой глобулы [3]. Обнаружено, что интенсивности спектров поглощения и испускания растворов белка, содержащих ионы металлов, снизились относительно спектров водного раствора белка. Это может свидетельствовать о взаимодействии ионов металлов с белком и изменении третичной структуры БСА. Кроме того, ионы являются тушителями флуоресценции, взаимодействуя с хромофорами в возбужденном состоянии, причем активность тушения зависит от доступности Tyr и Trp для растворителя.

Параметры вторичной структуры БСА в растворах и пленках исследовали методом ИК Фурье спектроскопии на приставке НПВО. В процессе высушивания пленки из водно-солевого раствора белка происходит существенное снижение активности воды, вследствие чего уменьшается степень гидратации белковой глобулы.

Часть исследований проведена с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ "Оптические и лазерные методы исследования вещества".

Литература:

1. Peters T. Jr., All about Albumin: Biochemistry, Genetics, and Medical Applications, Academic Press, 1995.
2. Bhushan B., Khanadeev V., Khlebtsov B., Khlebtsov N., Gopinath P. Impact of albumin based approaches in nanomedicine: Imaging, targeting and drug delivery. *Advances in Colloid and Interface Science*, 246 (2017), 13-39.
3. Cantor C. R., Shimmel P. R. *Biophysical Chemistry. Part 2*. San Francisco: W. H. Freeman and Company. 1980. P. 496.

ВЛИЯНИЕ КООРДИНАЦИИ ИМИДАЗОЛА К МЕТАЛЛОЦЕНТРУ НА ПРОЧНОСТЬ НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Шитов Д.А.,
Магистрант 1 года обучения
Института химии СПбГУ

Научный
руководитель: Тупикина Е.Ю., к.ф.-м.н.,
доцент, кафедра физической
органической химии, Институт
химии СПбГУ

Санкт-Петербургский государственный университет
shitovsky@gmail.com

Имидазол – пятичленный азотсодержащий гетероцикл, сочетающий в своей структуре два типа атомов азота: «пиридиновый» и «пирроловый» в составе NH-группы. По этой причине молекула имидазола может участвовать в образовании различных невалентных взаимодействий: водородных связей с молекулами доноров и акцепторов протона, NH-π и π-π взаимодействий, связывание с металлами и так далее. В свою очередь, важность данных взаимодействий заключается в том, что образование/разрыв невалентных взаимодействий с участием имидазола является важной стадией многих биологических процессов, например, транспорт аминокислот, содержащих имидазол, посредством тРНК лимитируется образованием водородной связи с «пирроловой» NH-группой имидазола.

Так, например, в гемопротеинах имидазол в составе L-формы аминокислоты гистидина за счёт «пиридинового» атома азота координируется к металлу в составе порфиринового ядра. Как показано в работах [1]-[3], прочность связи имидазола с металлом напрямую коррелирует с прочностью водородной связи с акцептором протона, которую имидазол образует посредством «пирроловой» NH-группы. Интерес к гемопротеинам обусловлен их биологическими функциями в живых организмах: с их помощью происходит фиксация и транспорт молекул кислорода, а также осуществляется электронный перенос. Посредством образования дополнительных водородных связей с участием имидазольного фрагмента, можно влиять и на координацию железа по кислороду, определяя прочность окси-гемопротеинового комплекса, что можно использовать для регулирования биологической активности гемопротеинов.

В работе предполагается поиск кристаллических структур гемопротеинов в рентгеноструктурной базе данных PDB, содержащих гистидин, координированного по металлу. На основании паттернов кристаллических структур будут определены молекулярные фрагменты, включающие в свой состав железо (в составе порфиринового кольца), по которому будет координирован имидазол (рисунок 1).

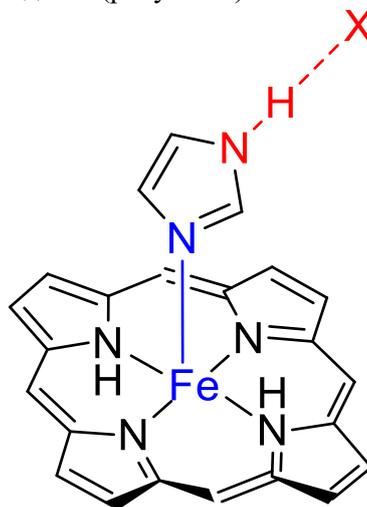


Рисунок 1. Рассматриваемая в работе модельная система, молекула акцептора протона (красным цветом показана водородная связь с ним) $X = \text{H}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$, синим цветом показана координация имидазола по металлоцентру.

Затем методами квантовой химии будет произведена оптимизация ядерной конфигурации модельных молекулярных фрагментов, на основании геометрических (расстояния между ядрами азота и металла), спектральных (частоты ядерных колебаний и химические сдвиги ядер) и электронных (топологический анализ функций распределения электронной плотности в рамках концепции QТАИМ) параметров будет установлена корреляция между прочностью водородной связи, образуемой имидазолом, и прочностью его связывания с металлоцентром.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-73-00094.

Литература:

1. Douglas R.G. & Rousseau, D.L. Hydrogen bonding of iron-coordinated histidine in heme proteins // *Journal of Structural Biology*. 1992. № 1. P. 13–17.
2. Sugishima Masakazu & Sakamoto, Hiroshi. Crystal structure of rat apo-heme oxygenase-1 (HO-1): Mechanism of heme binding in HO-1 inferred from structural comparison of the apo and heme complex forms // *Biochemistry*. 2002. № 41. P. 7293–7300
3. Vlasova I. I. Peroxidase Activity of Human Hemoproteins: Keeping the Fire under Control // *Molecules*. 2018. № 10. P. 1–27

© Д.А. Шитов, Е.Ю. Тупикина, 2023

ФАРАДЕЕВСКОЕ ВРАЩЕНИЕ НА ОБЪЁМНЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ ПЕРОВСКИТА МАРbI₃

Шумицкая А. А.,
Бакалавр 4 года обучения,
Санкт-Петербургский государственный университет,
физический факультет,
кафедра фотоники

Научный руководитель:
Рыжов И. И., к.ф.-м.н.,
старший преподаватель, кафедра фотоники,
НИИ Физики им. В.А. Фока

Санкт-Петербургский государственный университет
st087715@student.spbu.ru

Эффект Фарадея (фарадеевское вращение) – магнитооптический эффект, заключающийся в повороте плоскости поляризации линейно-поляризованного света, проходящего через оптически не активное вещество, находящееся во внешнем магнитном поле. Характер фарадеевского вращения определяется типом магнетизма вещества. Исследуя его в зависимости от температуры и условий фотолегирования, можно оценить пара- и диамагнитные вклады в исследуемом твёрдом теле. Присутствие фарадеевского вращения, связанного с парамагнетизмом, является необходимым условием для возможности изучения образца методом спектроскопии спиновых шумов (ССШ).

В настоящей работе исследуется фарадеевское вращение на перовските МАРbI₃. Перовскиты – новые и крайне перспективные материалы, которые используются в солнечной энергетике. Эти материалы даже вошли в топ-10 прорывов 2013 года журнала “Science” [1]. В силу их новизны накопление базовых знаний об оптике и магнетизме этих систем происходит в настоящее время (см., напр. [2]), и выращиваемые в РЦ «Нанопотоника» СПбГУ кристаллы перовскитов необходимо предварительно характеризовать. Для этого была создана установка измерения фарадеевского вращения. Температура в эксперименте регулируется при помощи нагревателя из тонкой проводящей плёнки, на которой закреплён образец. Магнитное поле создаётся электромагнитной катушкой, запитанной от генератора переменного тока. Фарадеевское вращение измеряется стандартным поляриметрическим приёмником, состоящим из балансного фотодетектора, генератора звуковых частот и синхронного детектора. Величина вращения измеряется в нескольких температурных точках с шагом в 10°C.

При повышении температуры наблюдается уменьшение вращения плоскости поляризации, что свидетельствует об уменьшении парамагнитного вклада в соответствии с законом Кюри. При понижении температуры ниже определённого критического значения (57°C) сигнал резко исчезает, что связано со структурным фазовым переходом кристалла [3].

Литература:

1. Science's top 10 breakthroughs of 2013 : Science, 2013.
2. Energy Tuning of Electronic Spin Coherent Evolution in Methylammonium Lead Iodide Perovskites / Guadalupe Garcia-Arellano and other : HAL open science, 2021. 20 p.
3. Defect-induced local variation of crystal phase transition temperature in metal-halide perovskites / A. Dobrovolsky and other : Nature communications, 2017. 8 p.