



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

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



penScience2025

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**XII Всероссийского молодежного
научного форума
с международным участием
«Open Science 2025»**



12-14 ноября 2025 г.
Гатчина



В данном выпуске представлены аннотации докладов XII Всероссийского молодежного научного форума с международным участием «Open Science 2025», 12-14 ноября 2025 года, г. Гатчина.

Проведению форума оказал поддержку



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

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



Спонсором форума стал АО «Невский Проект».

Сборник подготовили: А.Н. Железова, Е.Г. Прокофьева,
Н.В. Дмитриева.

Обложка: Е.В. Калоева.

Примечание: материалы представлены в авторской редакции.

©НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2025

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели программного комитета:

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

Секретарь программного комитета:

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

Члены программного комитета:

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

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели организационного комитета:

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

Заместители председателей организационного комитета:

Степанова Анастасия Александровна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Железова Алина Николаевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Секретарь организационного комитета:

Калоева Екатерина Витальевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Члены организационного комитета:

Буш Наталия Константиновна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Воронцов Владимир Игоревич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Дмитриева Надежда Васильевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Дутова Полина Дмитриевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Жеронкина Римма Александровна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Иванова Екатерина Георгиевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Иванова Любовь Алексеевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Карпенко Андрей Николаевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Миндалев Павел Юрьевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Плякина Екатерина Владимировна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Парамонова Татьяна Николаевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Рябokonь Ирина Сергеевна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
Щеколдина Карина Владимировна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

СОДЕРЖАНИЕ

Генетика, биомедицина, биофизика	5
Теоретическая физика	59
Физика атомного ядра и частиц	90
Физика и техника реакторов и ускорителей	102
Физика конденсированного состояния	105
Функциональные и наноструктурированные материалы	121
Химия неорганических материалов и гибридных органонеорганических систем	163
Ядерная медицина	176

Генетика, биомедицина, биофизика



Получение и характеристика радиорезистентных субпопуляций клеточной линии CT26-WT: сравнительный анализ радиочувствительности и лекарственной устойчивости in vitro

В.С. Бурдаков¹, Т.А. Антышева¹, А.Л. Коневега^{1,2}, А.В. Васин², А.А. Богданов³, Н.А. Верлов¹

E-mail: antysheva_ta@pnpi.nrcki.ru

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

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

³Онкологический центр имени Н.П. Напалкова, Санкт-Петербург, Россия

Радиорезистентность опухолевых клеток остается ключевым фактором, ограничивающим эффективность лучевой терапии. Формирование устойчивости к ионизирующему излучению тесно связано с комплексным фенотипическим сдвигом, часто ассоциированным с множественной лекарственной устойчивостью, что делает изучение этих процессов критически важным для оптимизации противоопухолевой терапии [1, 2].

Целью работы является изучение процесса формирования радиорезистентного фенотипа в клеточной линии колоректального рака мыши CT26-WT при различных режимах фракционированного облучения и оценка взаимосвязи радиорезистентности с лекарственной устойчивостью.

Радиорезистентные субпопуляции получали путем фракционированного облучения клеточной линии CT26-WT с использованием двух режимов: 20×2 Гр (CT26-WT-RR2) и 4×10 Гр (CT26-WT-RR10) при одинаковой суммарной дозе 40 Гр. Радиочувствительность оценивали методами клоногенного теста, метаболического теста (Alamar Blue) и импедансометрии (xCELLigence). Морфологические изменения анализировали с помощью инвертированной микроскопии. Распределение клеток по фазам клеточного цикла определяли методом проточной цитометрии. Чувствительность к химиотерапевтическим препаратам (цисплатин, гемцитабин) тестировали колориметрическим методом.

Субпопуляция CT26-WT-RR10 проявила наиболее выраженный радиорезистентный фенотип по сравнению с родительской линией и субпопуляцией CT26-WT-RR2. Морфологический анализ выявил признаки эпителиально-мезенхимального перехода: увеличение размеров клеток, изменение формы на веретенообразную, снижение плотности межклеточных контактов. При анализе клеточного цикла в субпопуляции CT26-WT-RR10 отмечено незначительное увеличение доли клеток в фазе G1 и снижение в S-фазе. Оценка лекарственной устойчивости показала повышенную резистентность субпопуляции CT26-WT-RR10 к цисплатину (выживаемость увеличена на 25-40%) и гемцитабину (на 15-20%) по сравнению с родительской линией.

Режим фракционирования 4×10 Гр оказался более эффективным для формирования радиорезистентного фенотипа по сравнению с режимом 20×2 Гр при идентичной суммарной дозе. Приобретенная радиорезистентность сопровождается морфологическими признаками эпителиально-мезенхимального перехода и перекрестной устойчивостью к химиотерапевтическим препаратам. Полученные результаты демонстрируют критическую важность индивидуализации режимов фракционирования для минимизации риска развития множественной лекарственной устойчивости в клинической практике.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2025-511)

1. De Mey S, Dufait I, De Ridder M. Radioresistance of Human Cancers: Clinical Implications of Genetic Expression Signatures // Front Oncol. 2021. V. 11. P. 761901. DOI:10.3389/fonc.2021.761901
2. Vaidya FU, Sufiyan Chhipa A, Mishra V, Gupta VK, Rawat SG, Kumar A, Pathak C. Molecular and cellular paradigms of multidrug resistance in cancer // Cancer Reports. 2022. V. 5. № 12. P. e1291. DOI: 10.1002/cnr2.1291

Механизмы терапевтического действия препаратов серебра

А.А. Анциферова^{1,2}, П.К. Кашикар^{1,2,3}

E-mail: aiyoga@yandex.ru

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

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

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

Антисептические свойства серебра хорошо известны и успешно применяются в медицине с древних времен. Первые упоминания об использовании серебра халдеями датируются 4000 г. до н.э. Впоследствии его успешно применяли финикийцы, греки, римляне, египтяне [1]. В настоящее время спектр используемых форм серебра в фармацевтике, сельском хозяйстве, пищевой и косметической промышленности весьма широк. Это – соли серебра, соединения серебра с серой и наночастицы серебра.

Механизм бактерицидного действия серебра, базирующийся на исследованиях Луи Пастера XIX в. по патогенности инфекционных заболеваний и заключающийся в «уничтожении», «подавлении» болезнетворных организмов, поддерживается мировым научным сообществом и в настоящее время. Однако многовековой опыт успешного применения различных препаратов серебра в медицинских целях, а также ряд современных научных исследований ставят под сомнение достаточность мировоззрения, основанного на идее такого механизма.

Действительно, в хирургии хорошо известны регенерирующие и ранозаживляющие свойства серебра. Показано стимулирующее действие наночастиц серебра, цитрата серебра на поведенческие и когнитивные функции, фертильность лабораторных млекопитающих. Известно о стимуляции роста ряда культурных растений при экспозиции препаратами серебра, что в настоящее время широко используется в сельском хозяйстве.

В настоящей работе обобщены данные из научной литературы и оригинальные результаты авторов по эффектам стимуляции функций живых организмов под действием соединений серебра [2] и предложена новая концепция механизма терапевтического антисептического действия серебра, заключающаяся в реализации эустресса – положительного стресса на общеорганизменном уровне. Распространение этой идеи о механизме действия препаратов серебра в отношении ряда заболеваний и другой этиологии, таких как, рак и болезнь Альцгеймера, также позволяет успешно объяснить наблюдаемые терапевтические эффекты таких препаратов.

Авторы, вместе с тем, полагают, что риски при известных патологиях обусловлены в большей степени не столько действием патогена, а неэффективной реакцией самого организма на раздражитель или патоген, представляющей собой условный или безусловный рефлекс и в ряде случаев в той или иной степени поддающейся произвольной психофизическому саморегулированию [3].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 24-19-00792).

1. Alexander JW. // Surg Infect (Larchmt). 2009. V. 10. N. 3. P. 289-292. doi: 10.1089/sur.2008.9941.
2. Antsiferova AA, Kashkarov PK. // Journal of Biological Regulators and Homeostatic Agents. 2025. V. 39. N. 2. P. 3303. <https://doi.org/10.54517/jbrha3303>
3. Линдеман Х. Система психофизического саморегулирования. Москва. 1992. с. 103-159

Изменение свойств модельных липидных мембран под действием полифенолов: роль насыщенности и длины ацильных цепей***Архипов А.В.¹, Мартынюк В.А.¹, Малыхина А.И.¹, Ефимова С.С.¹, Остроумова О.С.¹***

E-mail: arkhypov.art@mail.ru

¹*Институт цитологии Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия*

Изменения липидного состава биологических мембран, такие как удлинение и изменение степени ненасыщенности ацильных цепей, связывают с развитием резистентности к лекарственным препаратам у простейших рода *Leishmania* и бактерий [1, 2], а также играют роль в патогенезе ряда заболеваний, в частности, болезни Паркинсона [3]. Перечисленные социально-значимые заболевания ложатся тяжелым бременем на системы здравоохранения стран всего мира, что делает актуальным исследование влияния лекарственных соединений на биологические мембраны различного состава. Перспективными средствами для терапии этих патологий являются флавоноиды, обладающие антимикробным и противовоспалительным действием [4, 5], которое может быть опосредовано их взаимодействием с мембранами клеток. В связи с этим целью работы являлась оценка влияния ряда флавоноидов на свойства, в частности граничный потенциал, модельных липидных мембран при варьировании их состава.

Изменение граничного потенциала мембраны при адсорбции флавоноидов, кверцетина, лютеолина, байкалеина, и хризина оценивали по изменению K^+ -нонактин-индуцированного трансмембранного тока, протекающего через липидные бислои из различных фосфатидилхолинов (ФХ) (18:1, 18:3 и 22:1). Модельные мембраны формировали по методу Монтала и Мюллера [6]. Параметризация флавоноидов для вычислений методом молекулярной динамики была проведена с помощью CgenFF. Модели мембран были собраны в CHARMM-GUI. GROMACS 2023.2 применяли для компьютерных симуляций с использованием силового поля CHARMM36M. Мембраны размером 6х6х8 нм содержали 120 молекул 18:1 ФХ, 18:2 ФХ или 22:1 ФХ и 12 молекул флавоноидов в буферном растворе 0.1 М KCl. Время симуляции каждой системы составляло 200 нс.

При использовании *in vitro* и *in silico* подходов показано, лютеолин, кверцетин и хризин существенно снижают граничный потенциал мембран, в то время как байкалеин способен его незначительно увеличивать. Диполь-модифицирующее действие лютеолина, кверцетина и хризина увеличивается в ряду 18:3 < 18:1 < 22:1. Способность байкалеина увеличивать дипольный потенциал слабо зависит от длины и степени ненасыщенности формирующих бислои фосфатидилхолинов. Обсуждается роль изменения гидратации мембран и плотности упаковки липидов в механизмах модификации дипольного потенциала тестируемыми флавоноидами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ № 25-14-00162.

1. Moncada-Diaz M.J., Rodríguez-Almonacid C.C., Quiceno-Giraldo E., Khuong F.T.H., Muskus C., Karamysheva Z.N. Molecular Mechanisms of Drug Resistance in *Leishmania* spp. // *Pathogens*. 2024. Vol. 13. Iss. 10. Art. 835.
2. MacDermott-Opeskin H.I., Gupta V., O'Mara M.L. Lipid-mediated antimicrobial resistance: a phantom menace or a new hope? // *Biophysical Reviews*. 2022. Vol. 14. P. 145–162.
3. Barbuti P.A., Guardia-Laguarta C.P. The role of alpha-synuclein in synucleinopathy: Impact on lipid regulation at mitochondria–ER membranes // *npj Parkinson's Disease*. 2025. Vol. 11. Art. 103.
4. Xie Y., Yang W., Tang F., Chen X., Ren L. Antibacterial Activities of Flavonoids: Structure-Activity Relationship and Mechanism // *Current Medicinal Chemistry*. 2015. Vol. 22. Iss. 1. Al-Khayri J.M., Sahana
5. G.R., Nagella P., Joseph B.V., Alessa F.M., Al-Mssallem M.Q. Flavonoids as Potential Anti-Inflammatory Molecules: A Review // *Molecules*. 2022. Vol. 27. Iss. 9. Art. 2901.
6. Montal M., Mueller P. Formation of bimolecular membranes from lipid monolayers and a study of their electrical properties // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 1972. Vol. 69. Iss. 12. P. 3561–3566.

Роль каинатных рецепторов в сенсорной передаче: анализ функции гена *ekar* *Drosophila melanogaster*

*А.Р.Атамирзаева*¹, *С.В.Саранцева*²

E-mail: angelinaatamirzaeva3842@gmail.com

¹Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Россия

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

Каинатные рецепторы - это тип глутаматных рецепторов [1], состоящий у человека из 5 субъединиц (GluK1-5), каждая субъединица кодируется отдельным геном. В отличие от остальных типов глутаматных рецепторов, каинатные имеют канонические ионотропные и неканонические метаболитные функции [2]. Являются интегральными тетрамерными белками с большим структурным и функциональным разнообразием [3]. В ЦНС располагаются как на пресинаптической, так и на постсинаптической мембранах. [2]

У *Drosophila melanogaster* предполагается наличие нескольких каинатных рецепторов - Clumsy, DKaiR1C, DKaiR1D и CG11155, они, гипотетически, отвечают за восприятие световой волны определенной длины. Аннотирован каинатный ионотропный рецептор - EKAR, который располагается на мембранах фоторецепторов в глазной системе плодовой мушки и связан с функцией зрения [1,4].

Белок EKAR участвует в деполяризации фоторецепторов, вызванной световым воздействием через механизм ретроградного глутамата, который высвобождается амакриновыми клетками: при световой стимуляции фоторецепторы гиперполяризуются и высвобождают тормозной нейромедиатор гистамин. Гистамин связывается с амакриновыми клетками, приводит к их гиперполяризации, и, при определенных условиях, происходит выделение глутамата. Белок EKAR получает сигнал выделенного глутамата и способствует к деполяризации фоторецепторов. Такая ретроградная регуляция является важным механизмом для возбудимости фоторецепторов и поддержания их светочувствительности [5].

Кодируется белок EKAR геном *ekar* (CG9935), который располагается на 4 хромосоме [1, 6]. Ген экспрессируется в окончаниях фоторецепторов, в зрительной доле, глазных дисках, кольцевой железе мозга личинки [6]. Ген экспрессируется на стадиях позднего эмбриона *Drosophila melanogaster*, на стадии куколки и у самцов. Среди ортологов гена, наибольшую схожесть с *ekar*, по мнению множества интернет-ресурсов, имеет ген человека, кодирующий белок GRIK1 [1].

В настоящее время, основной проблемой в данной сфере является недостаточное осведомление о строении и работе каинатных рецепторов у *Drosophila melanogaster*.

1. Gene: Dmel/Ekar [электронный ресурс] FlyBase – Режим доступа: <https://flybase.org/> (дата обращения: 19.06.2025)
2. Попов А.В., Кушнирёва Л.А., Доронин М.С. Каинатные рецепторы-ключ к пониманию синаптической пластичности, обучения и памяти (обзор) //Современные технологии в медицине. – 2017.– Т. 9. – №. 4. – С. 228-238.
3. Перфилова В. Н., Тюренков И. Н. Глутаматные ионотропные рецепторы: структура, локализация, функции //Успехи физиологических наук. – 2016. – Т. 47. – №. 1. – С. 80-96.
4. Li Y. et al. Novel functional properties of Drosophila CNS glutamate receptors //Neuron. – 2016. – Т. 92. – №. 5. – С. 1036-1048.
5. Hu W. et al. Ih channels control feedback regulation from amacrine cells to photoreceptors //PLoS biology. – 2015. – Т. 13. – №. 4. – С. e1002115.
6. Stinchfield M. J. et al. Fourth Chromosome Resource Project: a comprehensive resource for genetic analysis in Drosophila that includes humanized stocks //Genetics. – 2024. – Т. 226. – №. 2. – С. iyad201.

Оценка влияния мутации гена Nxf1 на двигательную активность у личинки *Drosophila melanogaster*

К.В. Ахромов^{1,2}, Е.В. Рябова¹, Е.В. Голубкова², С.В. Саранцева¹

Email: ahromov.kv@gmail.com

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

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

Nxf1 (nuclear export factor) – эволюционно консервативный ген семейства Nxf, отдельные представители которого встречаются в кладе заднежутиковых [3]. Роль белка NXF1 в клетке – ядерно-цитоплазматический транспорт матричной РНК. У человека нарушения в генах семейства Nxf широко изучаются как причина возникновения некоторых заболеваний, связанных с развитием нервной системы [4], тогда как у дрозофилы мутации гена Nxf1 приводят к стерильности, нарушениям полёта и памяти.

Известно, что личинки дрозофилы обладают несколькими схемами поведения: повороты, вращения головой, кручение с изгибанием и ползание вперёд и назад [1], и эти движения генерируются сокращениями стенки тела [2]. Исходя из данных о наличии нарушений нервно-мышечных синапсов при мутациях гена Nxf1, целью данной работы является оценка частичной делеции гена Nxf1 (аллель *sbr¹²*) на поведение личинок *Drosophila melanogaster*.

Для выполнения этой работы использовались два метода: анализ двигательной активности с помощью видеосъёмки и анализ двигательной активности с помощью инфракрасной детекции. Анализ с помощью видеосъёмки проводился в чашке Петри, наполненной 4% агарозой. Инфракрасная детекция осуществлялась с помощью прибора DAM5H *Drosophila Activity Monitor*.

В результате работы были обнаружены статистически значимые отличия в двигательной активности особей, несущих аллель *sbr¹²*, от контрольных особей, что может показывать значимую роль продуктов гена Nxf1 в развитии и функционировании нервно-мышечных синапсов.

1. Green C. H., Burnet B., Connolly K. J. Organization and patterns of inter-and intraspecific variation in the behaviour of *Drosophila* larvae // *Animal Behaviour*. – 1983. – Т. 31. – №. 1. – С. 282-291.
2. Heckscher E. S., Lockery S. R., Doe C. Q. Characterization of *Drosophila* larval crawling at the level of organism, segment, and somatic body wall musculature // *Journal of Neuroscience*. – 2012. – Т. 32. – №. 36. – С. 12460-12471.
3. Herold A., Klymenko T., Izaurralde E. NXF1/p15 heterodimers are essential for mRNA nuclear export in *Drosophila* // *Rna*. – 2001. – Т. 7. – №. 12. – С. 1768-1780.
4. Tapia Y. Y. et al. A Patient with a Small Deletion Affecting Only Exon 1-Intron 1 of the NXF5 Gene: Potential Evidence Supporting Its Role in Neurodevelopmental Disorders // *Genes*. – 2025. – Т. 16. – №. 5. – С. 571.

Методика оценки достижения состояния равновесия молекулярной системы по данным молекулярной динамики

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

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

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

Молекулярная динамика (МД) — это метод компьютерного моделирования, который исследует эволюцию системы атомов во времени путём численного решения уравнений движения для каждой частицы. Ключевое преимущество МД — возможность моделирования в условиях контролируемой температуры и давления, что особенно ценно для изучения биомолекул. Важной задачей анализа траекторий МД является оценка достижения молекулярной системой (белком, ДНК и т.д.) состояния равновесия.

Понимание стабильности молекулярных систем необходимо для изучения их структуры, функций и динамики. На стабильность влияет множество факторов: внутри- и межмолекулярные взаимодействия (ковалентные и водородные связи, Ван-дер-Ваальсовы силы, электростатическое взаимодействие, сольватация), а также внешние условия (температура, давление, pH). На сегодняшний день универсальная методика комплексной оценки достижения равновесия отсутствует.

Разработанный программный код предоставляет возможность оценить достигла ли молекулярная система равновесного состояния в независимости от внешних заданных условий. Благодаря использованию метода молекулярной суперпозиции, закрепления молекулярной системы в пространстве и наложении на закрепленную систему последующих по времени состояний этой же системы, можно оценить равновесие системы. Как мера равновесия используется построение трёхмерной сетки с присваиванием каждой ячейке уникального номера с помощью хеш-функции.

Программа разрабатывается на основе программного обеспечения GROMACS [1]. Она будет иметь открытый доступ к программному коду, что позволит другим исследователям использовать его для своих исследований по структурной биоинформатике.

1. Abraham, M., Alekseenko, A., Basov, V., Bergh, C., Briand, E., Brown, A., Doijade, M., Fiorin, G., Fleischmann, S., Gorelov, S., Gouaillardet, G., Grey, A., Irrgang, M. E., Jalalypour, F., Jordan, J., Kutzner, C., Lemkul, J. A., Lundborg, M., Merz, P., ... Lindahl, E. (2024). GROMACS 2024.3 Manual (2024.3). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.13457083>, бесплатный пакет программного обеспечения с открытым исходным кодом для высокопроизводительной молекулярной динамики и анализа результатов, 2025.

Применение микрофлюидных систем на основе пленочного фоторезиста для синтеза магнитных липосом

Брусина К. Е., Вальшина Р., Новикова С. П., Полидаускайте А. В., Гареев К.Г., Ситков Н.О.

E-mail: valshinaralina@gmail.com

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

Разработка микрореакторных методов синтеза липосом, в том числе с магнитными ядрами, представляется актуальной и важной задачей для современной нанотехнологии и биомедицины. В настоящей работе описан процесс создания микрофлюидной системы (МФС), предназначенной для получения магнитных липосом методом микроэмульсионного синтеза. Применение органических растворителей, агрессивных по отношению к традиционным материалам МФС, исключает использование полидиметилсилоксана и требует поиска более стойких решений. В качестве функционального слоя с каналами выбран пленочный фоторезист ORDYL FP 440, который после термической обработки проявляет достаточно высокую химическую устойчивость.

Топология МФС спроектирована с учетом требований к организации химических реакций в микроканалах. Она включает два инъекционных перекрестия, три входных и один выходной порт. Размеры каналов составляют 100 мкм, а в области перекрестий – 30 и 60 мкм. Подобный дизайн обеспечивает возможность эффективного смешения потоков и проведения синтеза. Изготовление МФС осуществлялось методом фотолитографии. Сухой пленочный фоторезист наносили на стеклянную подложку и ламинировали при 125 °С, что обеспечивало надежную адгезию материала с подложкой. Экспонирование проводилось ультрафиолетовым излучением с длиной волны 365 нм, после чего незаполимеризованные участки удалялись в растворе Na₂CO₃. Для герметизации применялось предметное стекло с отверстиями для входов, покрытое тем же фоторезистом. Соединение осуществлялось методом термокомпрессионного связывания при 180 °С в течение 60 мин. В процессе нагрева происходило испарение остаточного растворителя и образование химических связей между слоями. Дополнительно повышенная температура способствовала значительному увеличению химической стойкости полученного материала.

Проведенные испытания показали, что созданные структуры сохраняют целостность после выдерживания в хлороформе в течение 5 ч, что превышает длительность процесса синтеза. Это подтверждает применимость предложенной технологии для работы в условиях воздействия агрессивных сред. В экспериментальных образцах было продемонстрировано образование капель аэрозоля, что свидетельствует о работоспособности разработанной топологии и корректности технологического подхода. Таким образом, предложенный метод позволяет формировать надежные и химически стойкие микрофлюидные системы для синтеза магнитных наночастиц в липидной оболочке. Полученные результаты подтверждают перспективность использования термически обработанного фоторезиста как материала для изготовления МФС, устойчивых к действию органических растворителей, что открывает возможности для дальнейшего внедрения подобных систем в биомедицинских исследованиях и технологиях.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-10055).

1. Gareev K. G. et al. Biomimetic nanomaterials: diversity, technology, and biomedical applications //Nanomaterials. – 2022. – Т. 12. – №. 14. – С. 2485.
2. Sitkov N. et al. Study of the fabrication Technology of hybrid microfluidic biochips for label-free detection of proteins //Micromachines. – 2021. – Т. 13. – №. 1. – С. 20.
3. Nayak N. C. et al. Thermal bonding of PMMA: Effect of polymer molecular weight //Microsystem technologies. – 2010. – Т. 16. – С. 487-491.

Сравнительный анализ эндолизинов, кодируемых профаговыми областями геномов *Staphylococcus haemolyticus*, размещенных в базе данных NCBI RefSeq

А.В. Введенский

E-mail: Vvedenskiia@gmail.com

Научно-исследовательский институт системной биологии и медицины Роспотребнадзора, Москва, Россия

Эндолизины бактериофагов – белки, расщепляющие пептидогликан, – перспективные кандидаты для создания антибактериальных препаратов, направленных против стафилококков, обладающих множественной лекарственной устойчивостью и являющихся одной из причин нозокомиальных инфекций [1,2]. *Staphylococcus haemolyticus* отличается наибольшей устойчивостью к антибиотикам среди всех коагулаз-негативных стафилококков [3], в связи с чем поиск новых препаратов, способных преодолеть резистентность *S. haemolyticus* особенно актуален.

В настоящее время описано 24 типа эндолизинов фагов грамположительных бактерий [2]. В работе был проведен сравнительный анализ эндолизинов, найденных в профаговых областях геномов *S. haemolyticus*. Для исследования были взяты 34 полных генома *S. haemolyticus*, депонированных в базе данных NCBI RefSeq. Удалось идентифицировать 16 генов эндолизинов. Один ген кодирует эндолизин 4-го типа [2], относящийся к Pfam семейству N-ацетилмурамоил-L-аланин амидазы 3 (PHROG семейство 489). Семь генов кодируют эндолизины 14-го типа [2], относящиеся к семейству N-ацетилмурамоил-L-аланин амидазы 2 (PHROG 833). Остальные профаги кодируют тип эндолизинов (PHROG 635), ранее не описанный в литературе. Не описанный тип эндолизинов состоит из нескольких доменов: N-концевого амидазного домена второго типа, отвечающего за расщепление пептидогликана, SHAP (цистеин, гистидин-зависимая амидаза/пептидаза) домена, также участвующего в расщеплении пептидогликана, и двух C-концевых SH3 доменов (домен гомологичный Src третьего типа), необходимых для связывания с клеточной стенкой бактерий. Данный тип белков относится к PHROG семейству 635, однако анализ показывает, что это семейство является гетерогенным и включает в себя белки с различным числом и расположением доменов.

Антимикробная активность эндолизинов 4 и 14 типа была подтверждена экспериментально [4,5]. Кодируемые в геномах *S. haemolyticus* варианты эндолизинов различаются входящими в их состав каталитическими и вспомогательными доменами и могут иметь высокий антимикробный потенциал в отношении *S. haemolyticus* и других грамположительных бактерий.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 24-15-00419.

1. Barkova I.A., Izhberdeeva M.P., Sautkina A.A. Endolysins of bacteriophages. // J Microbiol Epidemiol Immunobiol. 2023. V. 100. No. 4. P. 126-134.
2. Liu H. et. al. Therapeutic potential of bacteriophage endolysins for infections caused by Gram-positive bacteria. // J Biomed Sci. 2023. V. 30 No. 1. P. 29.
3. Eltwisy H.O., Twisy H.O., Hafez M.H., Sayed I.M., El-Mokhtar M.A. Clinical Infections, Antibiotic Resistance, and Pathogenesis of *Staphylococcus haemolyticus*. // Microorganisms. 2022. V. 10 No. 6. P. 1130.
4. Son B., Kong M., Lee Y., Ryu S. Development of a Novel Chimeric Endolysin, Lys109 With Enhanced Lytic Activity Against *Staphylococcus aureus*. // Front Microbiol. 2021. V. 11. P. 615887.
5. Lu Y., et. al. Phage Endolysin LysP108 Showed Promising Antibacterial Potential Against Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. // Front Cell Infect Microbiol. 2021. V. 11. P. 668430.

Наночастицы сопряжённых полимеров как фотосенсибилизаторы нового поколения для эффективной фотоиндуцированной онкотерапии***А.А. Ветюгова^{1,2}, Е.Д. Благодарная², Ю.А. Исаева², Р.А. Акасов³, Ю.Н. Луносов²***

E-mail: a.shumickaya@ispm.ru

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия³Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия

Одним из ключевых направлений биомедицины является разработка новых агентов для эффективной терапии онкологических заболеваний. Фототерапия — неинвазивный метод борьбы со злокачественными опухолями, основанный на использовании фотосенсибилизаторов (ФС), которые локально активируются светом и вызывают повреждение опухолевых клеток. На сегодняшний день ведутся активные разработки ФС нового поколения, которые могут селективно накапливаться в опухолях и имеют поглощение в красном ($\approx 650\text{--}800$ нм) и ближнем инфракрасном (БИК) ($1000\text{--}1400$ нм) диапазонах спектра для глубокого проникновения в ткани [1].

В последние годы привлекли внимание ФС на основе органических донорно-акцепторных сопряжённых полимеров (СП) благодаря своей биосовместимости, лёгкости структурной модификации и уникальным физико-химическим свойствам. Комбинация донорных и акцепторных звеньев в структуре СП даёт возможность тонкой настройки их оптических свойств, позволяя получать материалы с поглощением в длинноволновой области спектра. В виде коллоидно-стабильных дисперсий такие материалы могут селективно накапливаться в опухоли, генерировать активные формы кислорода, обеспечивать биовизуализацию и гипертермию [2].

Применение ФС на основе сопряжённых донорно-акцепторных полимеров в фототерапии рака остаётся малоизученной, но перспективной областью, поэтому их целенаправленный синтез и оценка биологических свойств особенно актуальны для биомедицины. В данной работе исследованы водные дисперсии наночастиц (НЧ) на основе трёх новых органических полимерных полупроводников с нефуллереновым акцепторным ядром. Эти молекулы относятся к полупроводникам Y-серии, которые успешно применяются в органической электронике и фотовольтаике [3]. Для систематического анализа их свойств была подготовлена серия из трёх водных дисперсий НЧ на основе СП. Средние гидродинамические диаметры частиц были исследованы методом динамического светорассеяния и не превышали 60 нм, что соответствует оптимальным размерам для эффективной доставки и накопления в опухолевых клетках. Пики поглощения водных дисперсий НЧ находились в районе 600-700 нм, что соответствует красному «терапевтическому окну». Была изучена способность НЧ к фототермической конверсии. Сравнительный анализ цитотоксичности проводился на двух клеточных линиях карциномы молочной железы человека MCF-7 и Sk-Br-3. Значения полумаксимальных ингибирующих концентраций для облучённых на 740 нм (30 Дж/см^2) клеток лежали в диапазоне 10 до 15 мкг/мл, в темновом контроле клетки остались неповреждёнными. Фототоксический индекс для лучшего СП был $> 3,3$. Это демонстрирует высокий потенциал для применения данного класса соединений в качестве нового поколения ФС для эффективной фототерапии рака.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №25-13-00422

1. Smith A. M., Mancini M. C., Nie S. Second window for in vivo imaging //Nature nanotechnology. 2009. V. 4. No. 11. P. 710-711.
2. Lu B. et al. Organic conjugated small molecules with donor–acceptor structures: design and application in the phototherapy of tumors //Materials Chemistry Frontiers. 2022. V. 6. No. 20. P. 2968-2993.
3. Yang H. et al. Morphology Optimization of the Photoactive Layer through Crystallinity and Miscibility Regulation for High-performance Polymer Solar Cells //Angewandte Chemie International Edition. 2023. V. 62. No. 6. P. e202216338.

Ингибирование киназной активности mTOR как подход к восстановлению функций глюкоцереброзидазы на пациент-специфичных клетках при болезни Паркинсона, ассоциированной с мутациями в гене GBA1

А.И. Безрукова^{1,2}, Е.С. Галкина¹, К.С. Башарова^{1,2}, Г.В. Байдакова³, И.В. Милухина^{1,4}, Е.Ю. Захарова^{1,3}, С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.С. Усенко^{1,2}

E-mail: bezrukova_ai@pnpi.nrcki.ru

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

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

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

⁴Институт мозга человека им. Н.П. Бехтеревой РАН, Санкт-Петербург, Россия

Сегодня не существует нейропротекторной терапии для распространенного нейродегенеративного заболевания болезни Паркинсона (БП), в основе патогенеза которого лежит гибель дофаминергических нейронов в черной субстанции головного мозга и накопление белка альфа-синуклеина. Наиболее перспективной для разработки таргетной терапии является БП, ассоциированная с мутациями в гене GBA1 (GBA1-БП). Ген GBA1 кодирует лизосомный фермент глюкоцереброзидазу (GCase). Стратегии по разработке терапии для GBA1-БП направлены на восстановление функций GCase, активность которой снижена. Ранее нами в ходе транскриптомного профилирования клеточной и животной моделей паркинсонизма с дисфункцией GCase выявлено нарушение сигнального пути mTOR [1, 2]. Цель: оценить влияние ингибитора киназной активности mTOR на восстановление функции GCase на первичной культуре макрофагов периферической крови (ПКМПК) пациентов с GBA1-БП. В исследование включена ПКМПК, полученная от 14 пациентов с GBA1-БП и 20 неврологически здоровых индивидуумов (контроль). Клетки культивировались 24 часа в присутствии ингибитора активности mTOR - Torin 1. Эффективность ингибирования mTOR оценивалась по снижению фосфорилированного mTOR (Ser2448) и его субстрата фосфорилированного RPS6 (Ser235/236), а также оценивался относительный уровень белка GCase методом вестерн-блот. Активность GCase и концентрацию его субстрата гексозилсфингозина (HexSph) измеряли методом высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией. Количество и размер лизосом оценивали с помощью конфокальной флуоресцентной микроскопии.

ПКМПК пациентов с GBA1-БП характеризовалась снижением активности GCase, накоплением субстрата HexSph ($p<0.01$) без изменений в уровне белка GCase ($p>0.05$) по сравнению с контролем. Также ПКМПК пациентов с GBA1-БП характеризовалась снижением размера лизосом ($p<0.01$) без изменения их количества по сравнению с контролем ($p<0.05$). Torin1 приводил к увеличению активности GCase ($p<0.0001$) без изменений в концентрации HexSph, уровня белка GCase ($p>0.05$) на фоне увеличения размера и количества лизосом в ПКМПК пациентов с GBA1-БП по сравнению с необработанной культурой клеток ($p>0.02$).

Полученные результаты открывают новые возможности для таргетной терапии GBA1-БП. В частности, путем модулирования работы протеинкиназы mTOR для восстановления лизосомной функции GCase.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 24-25-00212).

1. Usenko T., et al. Comparative Transcriptome Analysis in Monocyte-Derived Macrophages of Asymptomatic GBA Mutation Carriers and Patients with GBA-Associated Parkinson's Disease // Genes. 2021. V.12. No 10. 1545.
2. Usenko T., et al. Whole Transcriptome Analysis of Substantia Nigra in Mice with MPTP-Induced Parkinsonism Bearing Defective Glucocerebrosidase Activity // Int J Mol Sci. 2023. V.24. No 15. 12164.

**Анализ биологической активности конъюгата эндометаллофуллере́на лютеция с
фолиевой кислотой и поливинилпирролидоном**

А.А. Ганина^{1,2}, И.А. Болгова^{1,2}, А.А. Борисенкова^{1,2}, О.И. Большакова¹, С.В. Саранцева¹

E-mail: nastya.ganina04@mail.ru

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

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

Фуллерены и их производные обладают широким спектром биологической активности, что предполагает их использование при создании инновационных терапевтических препаратов [1]. Биосовместимые конъюгаты фуллеренов и эндометаллофуллеренов с фолиевой кислотой (ФК) перспективны для целевой доставки к опухолевым клеткам, обладающим повышенной экспрессией фолатных рецепторов (ФР) на поверхности и могут стать основой фармпрепаратов для тераностики [2].

Целью работы было исследование биологической активности конъюгата эндометаллофуллере́на лютеция с ФК и поливинилпирролидоном (ФК-ПВП-Lu@C₈₂₋₈₄).

Анализ проводили на линиях опухолевых клеток с высоким и низким уровнем экспрессии ФР (HeLa и A549, соответственно), а также нормальных фибробластах кожи человека (DF2). Данные об интернализации конъюгата были получены методом проточной цитометрии. Визуализировали конъюгат, меченый FITC, с помощью голодомографического микроскопа HT-X1. МТТ-тест использовали для определения токсичности. Определяли уровень активных форм кислорода (АФК) в клетках через 24 часа после добавления конъюгата. Анализировали клеточный цикл и миграционную активность клеточных линий.

Было показано, что конъюгат проникает в клетки. При этом интенсивнее светится в клетках с высоким уровнем экспрессии ФР. Согласно данным МТТ-теста после 24 и 48 часов воздействия конъюгат не оказывает токсического воздействия на используемые в экспериментах линии клеток в исследованном диапазоне концентраций. Уровень АФК как в нормальных, так и в опухолевых клетках, а также их клеточный цикл и миграционная активность оставались неизменными.

Таким образом, конъюгат ФК-ПВП-Lu@C₈₂₋₈₄ является нетоксичным для клеток, не усиливает миграцию клеток, что открывает перспективы для его дальнейшего изучения и потенциального применения в химиотерапии. Конъюгат лучше проникает в клетки с высоким уровнем ФР и накапливается в них, что свидетельствует о его возможном использовании для целевой доставки в клетки-мишени.

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

1. Bolshakova O., Zheryatyeva O., Sarantseva S. V. Fullerenes in vivo: toxicity and protective effects // *Nanotoxicology*. – 2025. – Vol. 19, No. 3. – P. 233–258.
2. Fullerene C60 conjugate with folic acid and polyvinylpyrrolidone for targeted delivery to tumor cells / A. A. Borisenkova и др. // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2024. – Vol. 25, No. 10. – P. 5350.

Образование минералов дрожжеподобным грибом *Scytalidium candidum*

Д. А. Головкина, Е. В. Журишкина, А. А. Кульминская

E-mail: golovkina_da@npni.nrcki.ru

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

Грибы представляют собой широко распространённую группу организмов, обитающих во всех типах природных экосистем — от почв и водоёмов до экстремальных сред обитания. Они играют активную роль в разложении органического вещества, круговороте биогенных элементов и формировании почвенной структуры. Благодаря высокой метаболической пластичности и адаптивности, грибы вовлечены в широкий спектр биохимических и экологических процессов, включая биоминерализацию, что подчёркивает их важнейшее значение для поддержания устойчивости экосистем. Способность грибов секретировать органические кислоты, ферменты и формировать микроструктуры способствует осаждению минеральных соединений, таких как карбонаты и оксалаты. Изучение механизмов грибной биоминерализации открывает перспективы для развития биотехнологических, экологических и восстановительных технологий в загрязнённых средах [1].

В нашем предыдущем исследовании [2] был выявлен потенциал использования дрожжеподобного гриба *Scytalidium candidum* 3С и бактерии *Bacillus licheniformis* DSMZ 8782 для стабилизации почвы. Экспериментальные данные показали, что обработка почвы грибной биомассой приводила к значительному увеличению её прочностных характеристик по сравнению с контролем. Обладая уникальными метаболическими свойствами, грибы оказывают влияние на микробиологические и физико-химические параметры почвы, способствуя её укреплению и улучшению структур. Вместе с тем, механизмы минералообразования у грибных организмов могут существенно отличаться как по природе, так и по характеристикам от аналогичных процессов у бактерий. В отличие от бактерий, биогенная минерализация которых широко исследована [3], фенотипические и молекулярные аспекты образования минералов у грибов, особенно у *Sc. candidum*, остаются недостаточно изученными. В работе были подробно рассмотрены процессы осаждения карбоната кальция дрожжеподобным грибом *Sc. candidum* 3С при внесении мочевины и хлорида кальция как в вместе, так и по отдельности в питательную среду. Полученные результаты позволили выдвинуть предположение о том, что данный микроорганизм обладает уреолитическим потенциалом.

1. Gadd G.M. Geomycology: biogeochemical transformations of rocks, minerals, metals and radionuclides by fungi, bioweathering and bioremediation // *Mycological Research*. 2007. V. 111. No. 1. P. 3-49.
2. Golovkina D.A. et al. From Waste to Strength: Applying Wastepaper, Fungi and Bacteria for Soil Stabilization // *Applied Science*. 2024, V. 14. P. 11678.
3. Ivanova L.A. et al. Matrix is everywhere: extracellular DNA is a link between biofilm and mineralization in *Bacillus cereus* planktonic lifestyle // *npj Biofilms Microbiomes*. 2003. V. 9. No. 9.

Динамический анализ вторичной и третичной структуры нуклеиновых кислот в траекториях молекулярной динамики с использованием алгоритма dssna***Горелов С.В.^{1,2}, Коневега А.Л.^{1,2,3}, Швецов А.В.^{1,2,3}***

E-mail: gorelov_sv@npri.nrcki.ru

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*²*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ), Санкт-Петербург, Россия*³*Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия*

В последние годы анализ структурных особенностей нуклеиновых кислот выходит за рамки традиционного статического описания. Биологические функции ДНК и РНК во многом определяются их конформационной гибкостью: локальные флуктуации, переходы между состояниями, временные нарушения или формирования водородных связей могут играть ключевую роль в процессах репликации, транскрипции, регуляции экспрессии генов и взаимодействиях с белками. При этом именно временная эволюция структуры макромолекул остаётся наименее полно охваченным аспектом в исследованиях.

Метод молекулярной динамики (МД) предоставляет полный набор данных о движении атомов во времени, однако интерпретация этих данных требует инструментов, способных выявлять и классифицировать структурные мотивы на лету, непосредственно в динамических траекториях. В нашей работе мы рассматриваем подход к такому анализу, ориентированный на детальное описание вторичной и третичной структуры нуклеиновых кислот с учётом их изменений во времени.

Используя этот подход, обеспечивается выявление динамических конформаций, перемещений оснований относительно друг друга, вариаций в сетях водородных связей и других межатомных взаимодействиях, которые могут оставаться незамеченными при традиционном статическом анализе. Такой тип анализа открывает возможность сопоставлять временные паттерны структурных изменений с функциональной активностью макромолекул, формировать интегральную картину их поведения в физиологических условиях и под действием внешних факторов.

В качестве инструмента реализации рассматриваемого подхода нами создан алгоритм DSSNA, сопоставимый по точности идентификации структурных мотивов с признанными системами анализа, такими как x3dna-dssr [1,2], но дополненный возможностью работы с временными данными. Это даёт исследователям расширенные возможности для изучения динамики ДНК и РНК — от моделирования в биофизике и структурной биологии до поиска новых мишеней для лекарственных соединений.

Предложенная стратегия анализа и использованный алгоритмический инструмент позволяют перейти от фрагментарного статического рассмотрения структуры нуклеиновых кислот к полному динамическому профилю, что повышает информативность экспериментов и усиливает интерпретационную ценность данных молекулярной динамики.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации грант №075-15-2024-630 (разработка алгоритма) и тема №1023031500033-1-1.6.7;1.6.4;1.6.8 Функциональная и структурная организация сложных, мультикомпонентных биологических систем и их динамика (молекулярная динамика и тестирования алгоритма).

1. Lu XJ, Olson WK. 3DNA: a software package for the analysis, rebuilding and visualization of three-dimensional nucleic acid structures. *Nucleic Acids Research*. 2003;31(17):5108–5121.
2. XJ, Olson WK. DSSR: an integrated software tool for dissecting the spatial structure of RNA. *Nucleic Acids Research*. 2015;43(21): e142.

Т-кадгерин в биогенезе внеклеточных везикул мезенхимальных стромальных клеток жировой ткани человека***В.А. Дзрелян, В.Ю. Сысоева, П.С. Климович, К.А. Рубина***

E-mail: dzreyan2016@mail.ru

НИИЛ Морфогенеза и репарации тканей Факультета фундаментальной медицины МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Внеклеточные везикулы (ВВ), секретируемые адипоцитами и другими клетками жировой ткани, играют ключевую роль в регуляции системного метаболизма. При метаболических заболеваниях, включая ожирение и сахарный диабет, нарушаются как секреция, так и функции ВВ, что усугубляет общую метаболическую дисфункцию. CDH13 (Т-кадгерин) представляет собой атипичный кадгерин, лишённый трансмембранного и цитоплазматического доменов и закреплённый в мембране с помощью GPI-якоря [1]. Т-кадгерин участвует в межклеточной адгезии и сигнальной передаче и является одним из ключевых поверхностных маркеров мезенхимальных стромальных клеток (МСК) [2]. Мы предположили, что Т-кадгерин, являясь рецептором адипонектина, важнейшего адипокина, продуцируемого жировой тканью и оказывающего системное действие на метаболизм, может опосредовать взаимодействие ВВ с клетками-мишенями в жировой ткани и регулировать не только метаболизм жировой ткани, но и процессы обновления и дифференцировки клеток.

Для изучения участия Т-кадгерина в паракринной регуляции метаболизма жировой ткани мы выделяли ВВ методом ультрафильтрации из кондиционированной среды трёх типов МСК человека: с гиперэкспрессией Т-кадгерина после вирусной трансдукции (ВВ МСК Т+), с контрольным вирусом (ВВ МСК GFP) и из нетрансдуцированных контрольных клеток (ВВ МСК). Иммуноблоттинг показал, что фракция везикул от МСК с гиперэкспрессией Т-кадгерина содержит максимальный уровень Т-кадгерина, что указывает на повышенную способность МСК к секреции Т-кадгерина, что может быть важным для межклеточной коммуникации. Выделенная фракция ВВ содержала маркеры везикул CD9+ и CD63+ и имела диаметр от 10 до 650 нм, с выраженным пиком при 145 нм ± 10,0 нм, соответствующим диапазону размеров экзосом и микровезикул. Мы показали, что клетки с гиперэкспрессией Т-кадгерина продуцируют меньше ВВ на клетку в 1.4-2.4 раза по сравнению с контрольными нетрансдуцированными клетками и в 1.4-2.8 раза по сравнению с МСК GFP. Это свидетельствует о том, что гиперэкспрессия Т-кадгерина снижает секрецию ВВ клетками МСК.

В совокупности наши данные подтверждают, что Т-кадгерин входит в состав ВВ МСК жировой ткани и позволяют предполагать, что Т-кадгерин вовлечён в паракринную регуляцию процессов метаболизма. Лишённый трансмембранного и цитоплазматического доменов Т-кадгерин секретируется МСК и посредством GPI-якоря прикрепляется к поверхности ВВ; вместе с тем молекулярные механизмы его доставки и включения в ВВ требуют дальнейшего изучения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-11-00205.

1. Sysoeva V., Semina E., Klimovich P., Kulebyakin K., Dzreyan V., Sotskaya E., Shchipova A., Popov V., Shilova A., Brodsky I., Khabibullin N., Voloshin N., Tkachuk V., Rubina, K. T-cadherin modulates adipogenic differentiation in mesenchymal stem cells: insights into ligand interactions // *Frontiers in cell and developmental biology*. 2024. № 12, P. 1446363.
2. Holley R.J., Tai G., Williamson A.J., Taylor S., Cain S.A., Richardson S.M., Merry C.L., Whetton A.D., Kielty C.M., Canfield A.E. Comparative quantification of the surfaceome of human multipotent mesenchymal progenitor cells // *Stem Cell Reports*. 2015. № 10;4(3). P.473-88.

Пути повышения эффекта радиосенсибилизации магнитными наночастицами оксида железа

А.С. Дмитриева^{1,2}, В.А. Рыжов¹, Я.Ю. Марченко¹

e-mail: dmitriyeva03@bk.ru

¹НИИЦ “Курчатовский институт” - ПИЯФ, Гатчина, РФ

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

Малигнизированные клетки характеризуются повышенной скоростью пролиферации и метаболизма, что обуславливает высокое базовое содержание в них активных форм кислорода (АФК). Таким образом, достижение критического уровня содержания АФК путем их дополнительной генерации внешними источниками наступит раньше в раковых клетках, чем в нормальных, данный факт может быть использован в выборе подходов для терапии. При воздействии на клетку ионизирующего излучения возможны два эффекта: прямое воздействие с разрывом ДНК и косвенное воздействие в результате радиолитической воды и образования свободных радикалов. Для достижения положительного терапевтического эффекта при использовании приемлемых для организма доз облучения этого может оказаться недостаточно, ввиду чего предлагается использовать радиосенсибилизаторы, в роли которых в данной работе выступают магнитные наночастицы на основе оксида железа (МНЧ). Ранее было показано, что совместная инкубация клеток с МНЧ при облучении рентгеном приводит к повышению гибели клеток на ~50% [1]. С целью повышения эффекта радиосенсибилизации МНЧ разрабатываются подходы для высвобождения наночастиц из эндосом за счет эффекта «протонной губки», реализующегося при протонировании аминокислотных групп на поверхности наночастиц, а также за счет генерации гидроксильного радикала на частицах без покрытия. Планируется синтез комбинированной оболочки на основе органических кислот, подвергающейся частичной деградации под воздействием ионизирующего излучения.

Целью работы являлся синтез МНЧ и покрытие их оболочкой, функционализированной аминокислотными группами для разработки путей повышения эффекта радиосенсибилизации.

Методы исследования. МНЧ синтезировали методом преципитации из солей железа (II) и (III) с использованием водного аммиака. Исследовали два типа частиц: без покрытия (хранили в атмосфере азота) и с покрытием из декстрана (9-11 кДа) с последующим аминированием полисахаридной оболочки. Максимально возможные концентрации МНЧ, не оказывающие подавляющего эффекта на рост клеток линии Gl-Tr, определяли в результате совместной инкубации клеток с МНЧ и последующим анализом на основе теста с резазуриновым красителем и окраской кристаллическим фиолетовым.

Выводы. Синтезированы магнитные наночастицы без покрытия и с аминированным декстрановым покрытием. Для последующих экспериментов были определены нетоксичные концентрации МНЧ для клеточной линии Gl-Tr: 5 мкг/мл для непокрытых частиц и 200 мкг/мл для частиц с аминированным декстраном. Образец аминированных МНЧ продемонстрировал коллоидную стабильность, в случае частиц без покрытия коллоидной устойчивости не наблюдалось.

1. Tran, N. H., Ryzhov, V., Volnitskiy, A., Amerkanov, D., Pack, F., Golubev, A. M., Arutyunyan, A., Spitsyna, A., Burdakov, V., Lebedev, D., Konevega, A. L., Shtam, T., & Marchenko, Y. (2023). Radiosensitizing Effect of Dextran-Coated Iron Oxide Nanoparticles on Malignant Glioma Cells. *International Journal of Molecular Sciences*, 24(20), 15150. <https://doi.org/10.3390/ijms242015150>

Роль гена *dob* в липидном гомеостазе *Drosophila Melanogaster****Ю.Ю.Дудкова¹, С.В.Саранцева², Шалагинова И.Г¹***

E-mail: dudkova2004@mail.ru

¹*Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Россия*²*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Липиды играют важную роль в развитии организма, участвуя в процессах старения [1], нейродегенерации [2], регуляции экспрессии генов и др. У большинства организмов жиры запасаются в виде особых молекул - триглицеридов (ТАГ) - нейтральных жиров, входящих в состав липидных капель. Нормальный обмен триглицеридов очень важен для осуществления многих функций в организме, важнейшими из которых являются строительная и энергетическая функции.

Drosophila melanogaster уже несколько десятилетий выступает в качестве удобного модельного объекта для изучения липидного обмена и последствий его нарушений. Было отмечено, что многие молекулярные механизмы являются эволюционно консервативными и предельно схожи у *Drosophila* и млекопитающих, в том числе и человека. Именно поэтому дрозофилу до сих пор активно используют в изучении различных нарушений в экспрессии генов, патологий, мутаций, или просто механизмов определенных молекулярных процессов. Стоит отметить, что, около 75% генов человека [3], вовлеченных в различные заболевания, присутствуют в виде ортологов у дрозофилы, поэтому на *Drosophila* можно моделировать многие заболевания человека.

Главным резервуаром триглицеридов *Drosophila melanogaster* является жировое тело. Основную роль в расщеплении триглицеридов играют липазы. У *Drosophila melanogaster* такой липазой является *brummer*, которая кодируется геном *bmm* (ортолог PNPLA2 млекопитающих). Было выявлено, что нарушение работы триглицеридлипазы может снижать продолжительность жизни [13], а также приводить к нейродегенерации.

Помимо хорошо изученной липазы *brummer* и кодирующего ее гена *bmm*, у *Drosophila melanogaster* был обнаружен паралогичный *bmm* ген - *doppelganger von brummer* (*dob*). Функция и роль *dob* в липидном обмене до сих пор до конца не определены. Предполагается, что *dob* активирует действие триацилглицерол липазы и участвует в гомеостазе липидов и катаболизме триглицеридов. Паралогами *dob* являются несколько генов человека, нарушение экспрессии которых связано с ожирением, диабетом, болезнью печени: PNPLA2 (пататин-подобный домен фосфолипазы, содержащий 2); PNPLA3 (пататин-подобный домен фосфолипазы, содержащий 3); и PNPLA5 (пататин-подобный домен фосфолипазы, содержащий 5).

Исследование роли *dob* и окончательное понимание функции этого белка в дальнейшем может способствовать более ясному пониманию значения генов паралогов в живых организмах.

1. Marschallinger J. et al. Lipid-droplet-accumulating microglia represent a dysfunctional and proinflammatory state in the aging brain //Nature neuroscience. – 2020. – Т. 23. – №. 2. – С. 194-208.
2. Fanning S., Selkoe D., Dettmer U. Parkinson's disease: proteinopathy or lipidopathy? //NPJ Parkinson's disease. – 2020. – Т. 6. – №. 1. – С. 3.
3. Yamaguchi M., Yoshida H. *Drosophila* as a model organism //Drosophila model for human diseases. – 2018. – С. 1-10.
4. Johnson A. A., Stolzing A. The role of lipid metabolism in aging, lifespan regulation, and age-related disease //Aging cell. – 2019. – Т. 18. – №. 6. – С. e13048.

**Стимуляция мезенхимальных стволовых клеток костного мозга *in vitro*
низкотемпературной аргоновой плазмой**

А.Е. Захарченко^{1,3}, П.А. Домнин¹, Е.В. Калинин¹, С.А. Ермолаева¹, Ю.С. Акишев²

E-mail: zakhachenko_a_e@mail.ru

¹*Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии им. почетного академика Н.Ф. Гамалеи Минздрава России, Москва, Россия*

²*Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Троицк, Россия*

³*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

В последние десятилетия значительный интерес для исследований стало представлять направление плазменной медицины, основанной на влиянии низкотемпературной плазмы (НТП) на биологические системы. НТП представляет собой поток ионизированных частиц, близкий по температуре к комнатной. Влияние НТП на живые системы, например, оказание бактерицидного действия, стимуляции иммунного ответа и ранозаживления [1], обусловлено действием активных форм кислорода и азота, которые образуются в результате прохождения возбужденных частиц через атмосферный воздух. В частности, интерес представляет свойство НТП усиливать клеточную пролиферацию, что имеет потенциал в области регенеративной медицины, посвященной изучению и применению в клинике стволовых клеток, так как при их генерации возникают проблемы, связанные с низкой эффективностью их культивирования и возникновением нежелательных дифференцировок на начальных этапах [2].

Целью данной работы является изучение эффекта НТП на пролиферацию мезенхимальных стволовых клеток (МСК), полученных из красного костного мозга крысы.

Используемый в исследовании источник НТП был описан ранее [3].

Для клеточной суспензии применяли как прямое воздействие НТП, так и опосредованное средой, подвергнутой обработке с различной продолжительностью обработки. При методе прямого воздействия суспензию клеток МСК 3-го пассажа в количестве $\approx 1,35 \cdot 10^6$ довели средой до общего объема 50 мл, после чего осуществляли облучение в течение 30 секунд и 1 минуты. Для опосредованного – среду подвергали обработке в течение 1 минуты, после чего добавляли к клеточной суспензии и выдерживали в течение времени, аналогичному при прямом воздействии. Далее все образцы высевали в культуральные флаконы в десятикратном разведении. Спустя несколько дней инкубации, до начала слияния колоний, клетки фиксировали этиловым спиртом, окрашивали азур-эозином по Романовскому, осуществляли прямой подсчет колоний. Спустя время инкубации, необходимое для роста клеток до количества, достаточного для подсчета с использованием камеры Горяева, производили снятие клеток в растворе Версена и трипсина и подсчитывали клетки в камере Горяева.

По результатам работы как при прямом воздействии, так и при опосредованном средой наблюдалось увеличение числа клеток в одной колонии при уменьшении общего числа клеток по сравнению с контролем, обработанным потоком инертного аргона, при дозозависимом уменьшении числа колоний.

Работа поддержана грантом РНФ №24-45-20006.

1. Сысолятина Е. В. и др. // Бактерицидное воздействие низкотемпературной аргоновой плазмы на биопленки, сформированные *in vitro* и в зубном канале. 2013. Журнал микробиологии, эпидемиологии и иммунобиологии, №6. С. 8-12.
2. Chailakhyan R. K. et al. Effect of non-thermal plasma on proliferative activity and adhesion of multipotent stromal cells to scaffolds developed for tissue-engineered constructs // Bulletin of Experimental Biology and Medicine. 2019. V. 167. No. 1. P. 182-188.
3. Sysolyatina E. et al. Use of non-thermal plasma for decontamination of titanium implants // Journal of Physics: Conference Series. 2022. V. 2270. No. 1. C. 012045.

Анализ состояния мальпигиевых сосудов самцов *Drosophila melanogaster* с нарушенной функцией гена *swiss cheese*

***Е.А. Зобнина*^{1,2}, *Е.А. Иванова*¹, *Е.В. Рябова*¹, *С.В. Саранцева*¹**

E-mail: elenazobnina3@gmail.com

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

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

Эволюционно-консервативный ген *swiss cheese* (*sws*) *Drosophila melanogaster* кодирует (лизо)фосфолипазу Б, играющую ключевую роль в контроле метаболизма одних из наиболее распространенных фосфолипидов в клетке, а именно фосфатидилхолина и лизофосфатидилхолина. У дрозофилы нарушение работы данного гена ведет к повышению уровня данных фосфолипидов, что приводит к обширным нарушениям в нервной (прогрессирующей с возрастом нейродегенерации и гибели клеток субпериневральной глии, составляющей основу гематоэнцефалического барьера) [1,2] и мужской репродуктивной (снижение плодовитости самцов) системах [3].

Экспрессия гена *sws* была проанализирована на разных стадиях онтогенеза дрозофилы. Она наблюдалась в слюнных железах, жировом теле, среднем кишечнике и мальпигиевых сосудах [3]. Мальпигиевые сосуды – это специализированный орган выделительной системы, осуществляющий экскреторную функцию. Они представляют собой две пары тонких длинных трубок, которые структурно делятся на несколько сегментов – начальный, основной, нижний и мочеточник. Главной функцией мальпигиевых сосудов является поддержание гомеостаза организма, заключающееся в выведении из гемолимфы конечных продуктов обмена вещества и регуляции её ионного и водного состава. Мальпигиевые сосуды образованы двумя типами клеток: основными и звездчатыми, между которыми формируются специализированные межклеточные соединения, в частности, септированные контакты. У насекомых септированные контакты являются функциональным аналогом плотных контактов позвоночных и участвуют в избирательном транспорте веществ [4].

В данной работе были использованы самцы *Drosophila melanogaster* с нонсенс мутацией в гене *sws* (*sws*¹), которая приводит к потере функциональных доменов в белке и самцы дикого типа (*Canton S*) в качестве контроля. В мальпигиевых сосудах были проанализированы следующие параметры: длина сосудов, размер ядер клеток и состояние септированных контактов. В результате работы было отмечено, что у линии *sws*¹ изменяется размер клеток мальпигиевых сосудов и нарушается структура септированных контактов между ними.

1. Ryabova E.V. et al. Morpho-Functional Consequences of Swiss Cheese Knockdown in Glia of *Drosophila melanogaster* // *Cells*. 2021. V. 10. №. 3. P. 529–548.
2. Melentev P.A. et al. Loss of *swiss cheese* in Neurons Contributes to Neurodegeneration with Mitochondria Abnormalities, Reactive Oxygen Species Acceleration and Accumulation of Lipid Droplets in *Drosophila* Brain // *International Journal of Molecular Sciences*. 2021. V. 22. №. 15. P. 8275–8303.
3. Melentev P.A. et al. *Drosophila* Lysophospholipase Gene *swiss cheese* Is Required for Survival and Reproduction // *Insects*. 2022. V. 13. №. 1. P. 14–35.
4. Furuse, M.; Izumi, Y. Molecular dissection of smooth septate junctions: Understanding their roles in arthropod physiology. *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 2017, 1397, 17–24.

База данных протеоформных паттернов «2DE-pattern» как источник онкомаркеров

Е.С. Зорина^{1,2}, Н.Л. Ронжина¹, Н.В. Клопов¹, О.К. Легина¹, А.С. Потысьева¹, С.Н. Нарыжный¹

E.mail: el.petrenko@bk.ru

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

²Научно-исследовательский институт биомедицинской химии, Москва, Россия

Протеом человека чрезвычайно сложен и состоит не просто из множества белков, но из разнообразных белковых форм – протеоформ. В связи с растущим объемом информации о протеоформах необходим удобный подход к ее хранению и использованию. Ранее, для решения этой задачи нами была сконструирована база хранения данных, полученных с помощью нескольких подходов, основанных на разделении протеоформ двумерным электрофорезом в геле (2DE) с последующей масс-спектрометрией ESI-LC-MS/MS на Orbitrap Q Exactive Plus. Это классический 2DE, секционный 2DE и полу-виртуальный 2DE. Данная база данных, «2DE-pattern», находится в свободном интернет-доступе по адресу <http://2de-pattern.pnpi.nrcki.ru/index.html> [1]. Изначально мы разместили там паттерны протеоформ нормальных фибробластов и раковых, глиобластомных, клеток.

В настоящей работе мы представляем результаты дальнейшего наполнения базы. В этот раз это данные анализа раковых образцов печени (гепатоцеллюлярная карцинома) и контрольных нераковых образцов (нетрансформированная печень). Для этих образцов были построены белковые карты на основе 2DE и выявлено более 20 000 протеоформ, кодируемых более чем 4000 генами [2]. Данные протеоформы представлены в виде 3D-графиков и в виде тепловых карт. Это так называемые паттерны протеоформ. Сравнительный анализ паттернов может позволить выявить различия между нормой и раком на уровне протеоформ. Таким образом, специфичные для рака протеоформы могут быть выявлены и использованы в качестве онкомаркеров. Такой сравнительный анализ между нормальными и раковыми тканями (гепатоцеллюлярная карцинома/нетрансформированная печень) нами был проведен. Это позволило определить специфические белковые сигнатуры и общие паттерны для доброкачественных/злокачественных клеток печени человека. Таким образом, мы показали, что 2DE в сочетании с масс-спектрометрическим анализом ESI-LC-MS/MS позволяет с высокой эффективностью изучать гетерогенность протеомов. Оказалось, что в подавляющем большинстве случаев протеоформные паттерны одного и того же белка очень схожи, и основной (мажорный) пик соответствует теоретическим параметрам белка по заряду и весу (pI/Mw), т.е. не модифицирован. Но есть белки и с измененными паттернами. Для последующего, более детального анализа нами было отобрано 38 белков с повышенным уровнем в раковых образцах и с выраженными различиями в протеоформных паттернах между доброкачественными и злокачественными тканями. Кроме того, база «2DE-pattern» была усовершенствована таким образом, чтобы была возможность сравнительного анализа содержащихся в ней данных.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 24-24-00432.

1. Naryzhny S., Klopov N., Ronzhina N., Zorina E., Zgoda V., Kleyst O., Belyakova N., Legina O. // A database for inventory of proteoform profiles: “2DE-pattern”. Electrophoresis. 2020. T. 41, № 12. С.1118-1124.
2. Zorina E., Ronzhina N., Legina O., Klopov N., Zgoda V., Naryzhny S. // Proteoform Patterns in Hepatocellular Carcinoma Tissues: Aspects of Oncomarkers. Proteomes. 2025. V.13, N 3. P.27.

Мутация в гене *swiss cheese* приводит к нарушению барьерной функции среднего кишечника самцов *Drosophila melanogaster*

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

E-mail: ivanova_ea@pnpi.nrcki.ru

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

Желудочно-кишечный тракт *Drosophila melanogaster* выполняет важнейшие функции - поглощение, хранение и использование энергетических ресурсов, а также, играет ключевую роль в иммунитете и через взаимодействие с микробиотой, оказывает влияние на организм в целом. Главным органом желудочно-кишечного тракта является кишечник, который представляет собой эпителиальную трубку, состоящую из четырех типов клеток и структурно делящуюся на передний, средний и задний отделы. Именно в среднем кишечнике происходят процессы переваривания и всасывания веществ и реализуются механизмы защиты от патогенов. Клетками кишечника, осуществляющими данные функции, являются энтероциты – крупные полиплоидные клетки столбчатой формы, составляющие 90 % от всех клеток эпителия. Между ними находятся септированные контакты, которые обеспечивают структурную целостность и создают физический барьер в эпителии среднего кишечника.

Правильное функционирование данных процессов желудочно-кишечного тракта дрозофилы обеспечивается работой большого количества генов, в число которых может входить и ген *swiss cheese* (*sws*). Ранее было показано, что он экспрессируется в среднем кишечнике дрозофилы [1]. Его продукт гидролизует фосфатидилхолин до лизофосфатидилхолина или глицерофосфохолина, тем самым выполняя функции фосфолипазы В. У мух с мутацией в данном гене, наблюдаются обширные нарушения как в нервной системе (прогрессирующая гибель нейронов и субпериневральной глии) [2, 3], так и в мужской репродуктивной системе (снижение плодовитости самцов) [1].

В данной работе нами было определено, что ген *sws* экспрессируется в энтероцитах среднего кишечника, а также проанализирована морфология среднего кишечника и состояние кишечного барьера у самцов с мутацией в гене *sws*. У них наблюдались такие морфологические изменения как увеличение количества энтероцитов, нарушение их расположения и уменьшение просвета кишечника по сравнению с контролем. Кишечный барьер у таких самцов также оказался нарушен: во-первых, наблюдалась неоднородная структура септированных контактов, а во-вторых, декстран, который в норме находится только в просвете кишечника, визуализировался во всем организме. В результате этих исследований можно сделать вывод, что дисфункция данной фосфолипазы приводит к нарушению работы не только кишечного барьера, но и среднего кишечника в целом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-74-00165.

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

Спектр редких вариантов в генах *ABCA1*, *ABCG1*, *ABCG5*, *ABCG8* и *NPC1L1* у пациентов с нарушениями липидного обмена

А.Д. Изюмченко^{1,2}, К.О. Танаянц¹, К.В. Легостаева², О.А. Чумакова², К.В. Драчева²,
С.Н. Пчелина^{1,2}, В.В. Мирошникова^{1,2}

E-mail: izyumchenko_ad@pnpi.nrcki.ru

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

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

Нарушения липидного обмена (дислипидемии) могут приводить к развитию сердечно-сосудистых заболеваний, способствуя прогрессированию атеросклероза. Несмотря на успешное выявление большей части моногенных случаев дислипидемий [1], остаётся актуальным поиск новых генетических факторов, таких, как редкие варианты, которые в сочетании могут приводить к развитию полигенных форм нарушений обмена липидов. Редкие генетические варианты имеют популяционную распространенность <1% и могут быть статистически не связаны с изменением липидного обмена, но даже небольшое увеличение встречаемости аллеля (1-5%) у пациентов может свидетельствовать о его влиянии на развитие патологического процесса [2]. Весомый вклад в полигенную дислипидемию могут вносить редкие варианты в генах транспортеров холестерина.

Цель работы — изучить спектр редких вариантов в генах *ABCA1*, *ABCG1*, *ABCG5*, *ABCG8* и *NPC1L1* у пациентов с нарушениями липидного обмена в популяции северо-западного региона России.

Был проведен поиск редких вариантов (частота gnomAD менее 1%) в генах *ABCA1*, *ABCG1*, *ABCG5*, *ABCG8* и *NPC1L1* с использованием данных таргетного секвенирования для 169 пациентов с нарушениями липидного обмена. Было выявлено 14 вариантов в гене *ABCA1* (17 пациентов); 4 варианта в гене *ABCG1* (5 пациентов); 11 вариантов в гене *ABCG5* (18 пациентов); 7 вариантов в гене *ABCG8* (11 пациентов) и 9 вариантов в гене *NPC1L1* (29 пациентов), частота некоторых из них согласно базе данных RUSeq в России выше, чем в общемировой популяции. 19 пациентов (11%) были носителями гаплотипа p. (Val177Ile)/p. (His221Tyr)/p. (Ala271Phe) гена *NPC1L1*, который вероятно является специфичным для российской популяции (частота согласно базе данных gnomAD 0,0063, частота согласно базе данных RUSeq 0,042). Дополнительно нами была оценена частота варианта p. (Val177Ile) гена *NPC1L1* в группе пациентов с ангиографически верифицированным атеросклерозом (N=209) и в контрольной группе лиц без дислипидемии и сердечно-сосудистых заболеваний (N=234), однако различия не достигли статистической значимости. Таким образом, в настоящее время недостаточно данных о возможном влиянии гаплотипа p. (Val177Ile)/p. (His221Tyr)/p. (Ala271Phe) гена *NPC1L1* на развитие дислипидемии и атеросклероза, требуется расширение изучаемых выборок.

Проведенное исследование показывает перспективность дальнейшего поиска популяционно-специфичных вариантов генов транспортеров холестерина, как возможных маркеров развития нарушений липидного обмена, с использованием расширенных выборок.

Работа поддержана грантом РФФ №25-25-00351.

1. Мирошникова В. В. и др. Генетическое тестирование в кардиологии с помощью NGS панели: от оценки риска заболевания до фармакогенетики // Фармакогенетика и фармакогеномика. 2023. Т. 1. С. 7-19.

2. Мешков А. И. и др. Варианты генов *ANGPTL3*, *ANGPTL4*, *APOA5*, *APOB*, *APOC2*, *APOC3*, *LDLR*, *PCSK9*, *LPL* и риск ишемической болезни сердца // Российский кардиологический журнал. 2022 Т. 27. №. 10. С. 22-26.

Анализ различий в функциональной связанности между пациентами с шизофренией и здоровыми испытуемыми на основе теории графов

Д. А. Ковалишина

E-mail: kovalishina_da@nrcki.ru

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Функциональная связанность (functional connectivity, FC) регионов головного мозга традиционно рассматривается в терминах взаимодействий между областями интереса (regions of interest, ROI) [1-3]. Анализ паттернов связности на групповом уровне является перспективным направлением исследований [4]. В данной работе классический анализ функциональной связности был дополнен анализом графов, узлами которого выступали испытуемые, а ребрами – нормы между испытуемыми в группах.

Расчет FC был проведен на основе данных фМРТ на группе пациентов с шизофренией (12 мужчин и 12 женщин, средний возраст $40,7 \pm 10,6$ лет) (группа SCH). Контрольная группа (НС) была сформирована из 24 добровольцев (12 мужчин и 12 женщин, средний возраст $26,2 \pm 7,7$ лет). Регистрация данных фМРТ проводилась на томографе GE Signa Premier 3 Тл со следующими параметрами сканирования: время повторения (TR) 1300 мс, время эхо (TE) 30 мс, угол отклонения – 90 градусов, количество срезов – 62, толщина среза – 2 мм, расстояние между срезами – 0,2 мм. Расчет функциональной связанности был проведен с помощью программного обеспечения MULAN [6] для метрики из семейства корреляции.

Для визуализации различий между группами и анализа этих различий в программном обеспечении MATLAB [7] были рассчитаны нормы матриц корреляции для каждого испытуемого, по которым отдельно были построены взвешенные неориентированные графы каждой группы. Связи с весом ниже заданного порога обнулялись. Варьируя порог отсечения от 0 до 0,9, были рассчитаны диаметр и средняя длина пути обоих графов.

Полученные результаты показывают, что при низких порогах (0-0.3) диаметры графов практически почти не различаются. Однако, начиная с порога 0.4, диаметр графа НС значительно превышает диаметр графа SCZ. К тому же, на этом пороге наблюдается нарушение связности графа пациентов, в то время как граф здоровых добровольцев остается без изменений. Данный результат может свидетельствовать о том, что в целом в группе НС функциональная связанность выше и более однородна, чем в группе SCZ. Дальнейшие исследования будут направлены на расчет и анализ других метрик теории графов.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИИЦ «Курчатовский институт».

1. Lei D. et al. Graph Convolutional Networks Reveal Network-Level Functional Dysconnectivity in Schizophrenia // Schizophrenia Bulletin. 2022. Vol. 48, № 4. P. 881–892.
2. Matsumoto Y. et al. Disorganization of Semantic Brain Networks in Schizophrenia Revealed by fMRI // Schizophrenia Bulletin. 2022. Vol. 49, № 2. P. 498–506.
3. Friston K.J. Functional and effective connectivity in neuroimaging: A synthesis // Human Brain Mapping. 1994. Vol. 2, № 1–2. P. 56–78.
4. Serin E. et al. NBS-Predict: A prediction-based extension of the network-based statistic // NeuroImage. 2021. Vol. 244. P. 118625.
5. Li D. et al. The impact of indirect structure on functional connectivity in schizophrenia using a multiplex brain network // Journal of Psychiatric Research. 2024. Vol. 179. P. 257–265.
6. Wang H.E. et al. MULAN: Evaluation and ensemble statistical inference for functional connectivity // NeuroImage. 2018. Vol. 166. P. 167–184.
7. The MathWorks Inc. (2022). 9.13.0.2399474 (R2022b) Update 7, Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc. <https://www.mathworks.com>.

Соотношение активности глюкоцереброзидазы и уровня субстрата в периферической крови как биомаркер болезни Паркинсона у носителей вариантов в гене GBA1

А.Э. Копытова^{1,2}, М.А. Николаев^{1,2}, А.Д. Изюмченко^{1,2}, А.В. Артынюк¹, Г.В. Байдакова³, И.В. Милыхина⁴, Е.Ю. Захарова³, С.Н. Пчелина^{1,2}

E-mail: kopytova_ae@pnpi.nrcki.ru

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

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

³ФГБНУ Медико-генетический научный центр имени академика Н.П. Бочкова, Москва, Россия

⁴ФГБНУ Институт мозга человека им. Н.П. Бехтеревой РАН, Санкт-Петербург, Россия

Варианты в гене *GBA1*, кодирующем лизосомальный фермент глюкоцереброзидазу (GCase), вызывают болезнь Гоше (БГ) и являются наиболее значимым генетическим фактором риска болезни Паркинсона (БП) [1]. У большинства носителей патогенных вариантов *GBA1* никогда в жизни не развиваются симптомы паркинсонизма. Актуальным является поиск биомаркеров и предикторов развития БП у носителей вариантов в гене *GBA1*.

Целью данной работы является сравнение биохимических характеристик периферической крови пациентов с БП, носителей вариантов в гене *GBA1* (*GBA1*-БП) и здоровых носителей вариантов в гене *GBA1* (*GBA1*-носителей).

В исследование вошло 30 пациентов с *GBA1*-БП (13 гетерозиготных носителей «легких» вариантов и 17 носителей «тяжелых» вариантов в гене *GBA1*), 23 *GBA1*-носителей (13 гетерозиготных носителей «легких» вариантов и 10 носителей «тяжелых» вариантов в гене *GBA1*) и 249 индивидуумов контрольной группы. Все *GBA1*-носители прошли обследование у врача-невролога, подтвердившего отсутствие неврологических симптомов БП. Активность лизосомных ферментов и уровни лизосфинголипидов в периферической крови измеряли методом tandemного масс-спектрометрического анализа [2].

Ранее нами было показано снижение активности GCase и увеличение уровня субстрата в периферической крови у носителей вариантов в гене *GBA1*, независимо от статуса БП [2]. При этом уровень субстрата в периферической крови был повышен у пациентов с *GBA1*-БП по сравнению с *GBA1*-носителями. Далее в качестве поиска более чувствительного и специфичного биомаркера был рассмотрен новый показатель – соотношение активности GCase и уровня субстрата (Акт/субстрат). Показано, что данный показатель снижен у носителей вариантов в гене *GBA1* по сравнению с контролем, а также позволяет дифференцировать пациентов с БП от здоровых носителей ($p=0.007$). Для оценки возможности использования показателя Акт/субстрат в периферической крови в клинической практике в качестве предиктора БП у носителей вариантов в гене *GBA1* был проведен ROC-анализ. Точка отсечения показателя Акт/субстрат ≤ 0.59 (чувствительность метода 53,3%, специфичность метода – 86,4%, площадь под ROC-кривой 0.717 ($p=0.003$)), при этом для носителей «тяжелых» вариантов в гене *GBA1* показатель данного параметра ≤ 0.56 (чувствительность метода 47,0%, специфичность метода – 100%, площадь под ROC-кривой 0.788 ($p=0.001$)).

Биохимические показатели периферической крови, особенно соотношение активности GCase и уровня субстрата, могут служить перспективными биомаркерами для ранней диагностики развития БП у носителей вариантов в гене *GBA1*.

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

1. Toffoli M, Smith L, Schapira AHV. // J Neurochem. 2020;154(1):11–24.
2. Kopytova AE, et al. // Mov Disord. 2022; 37(8):1779-1781.

Получение и характеристика 1-аминоацилосигерматранов с физиологически активными аминокислотами

К.А. Королёнок^{1,2*}, Д.В. Лёзов^{1,2}, Т.А. Кочина¹

E-mail: korolenokkseniya@gmail.com

¹ Филиал НИЦ «Курчатовский институт»-ПНПФ-ИХС, Санкт-Петербург, Россия

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

Герматраны – это гиперкоординированные соединения германия с донорно-акцепторной связью N→Ge – представляют значительный интерес для исследований, благодаря уникальному строению и широкому спектру биологической активности [1]. Особый интерес представляет модификация герматранов физиологически активными лигандами, такими как аминокислоты, что позволяет целенаправленно изменять свойства получаемых соединений [2]. В настоящей работе исследовано взаимодействие диоксида германия с заменимыми (L-α-аланин, L-серин) и незаменимыми (L-валин, L-триптофан) аминокислотами и последующей реакцией полученных комплексов с тетраакис(2-гидроксиэтил) этилендиамином (THEED). Выбор аминокислот различного строения обусловлен перспективой создания соединений с направленной биологической активностью.

Синтез целевых соединений проводился двухстадийным методом через промежуточные комплексы GeO₂ с аминокислотами и последующим взаимодействием с THEED в водной среде при 80–90 °С в соответствии с ранее разработанной методикой [3]. Выходы 1-аминоацилосигерматранов составили 65–83%, при этом наибольшие выходы наблюдались для алифатических аминокислот. Полученные соединения представляют собой кристаллические продукты, хорошо растворимые в воде.

Структура синтезированных соединений подтверждена комплексом физико-химических методов. Данные ИК-спектроскопии показали характерные полосы валентных колебаний связи Ge-N в области 437–451 см⁻¹ и карбоксильных групп в области 1583–1589 см⁻¹. Анализ спектров ЯМР ¹H и ¹³C подтвердил формирование ацилосигерматрановой клетки и сохранение структурных особенностей аминокислотных фрагментов.

Исследование биологической активности включало компьютерный прогноз с использованием программы PASS и оценку цитотоксичности *in vitro*. Прогноз выявил выраженные антиоксидантные и антигипоксические свойства для всех соединений, а также противоопухолевую активность. Наибольшей цитотоксичностью характеризуется производное L-триптофана, что может быть связано с наличием ароматической системы в структуре аминокислоты. Соединения на основе L-α-аланина и L-серина проявили умеренную цитотоксичность, в то время как производное L-валина показало низкие токсические свойства.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования как заменимых, так и незаменимых физиологически активных аминокислот для создания новых биологически активных герматранов с регулируемыми свойствами.

Работа выполнена в рамках государственного задания (№ гос. рег. 1023032900385-8-1.4.3) филиала НИЦ «Курчатовский институт»-ПНПФ-ИХС.

Авторы выражают благодарность Инжиниринговому центру Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).

1. Негребцкий В.В. и др. Необычные координационные состояния элементов 14-й группы: Пента- и гексакоординированные комплексы // Координационная химия. 2009. Т. 35, № 3. С. 217–232.
2. Kondratenko Yu.A. et al. DFT study of hexacoordinate germanium compounds with BIS-TRIS and amino acid ligands // Mendeleev Communications. 2023. V. 33. Iss. 5. P. 601–604.
3. Ignatyev I.S. et al. Interaction of simple amino acids (glycine, α-alanine, β-alanine and L-valine) with germatranol hydrate // Journal of Molecular Structure. 2022. V. 1253. P. 132245.

О.М. Котб, П.Н. Лобачевский

E-mail: omarkotb@jinr.ru

Объединенный институт ядерных исследований, Московская область, Дубна, Россия.

Химическая дозиметрия ионизирующих излучений представляет собой удобный и достаточно точный инструмент измерения поглощенной дозы [1–3]. Она основана на измерении продуктов химических реакций, индуцированных излучением. Одним из наиболее известных химических дозиметров является так называемый Фрике дозиметр, основанный на спектрофотометрическом измерении концентрации ионов трехвалентного железа Fe^{3+} , которые образуются в результате окисления ионов двухвалентного железа Fe^{2+} продуктами радиолитического распада воды. Для увеличения относительно низкой чувствительности Фрике дозиметра было предложено добавить в его состав бензойную кислоту и краситель ксиленоловый оранжевый. Полученный химический состав получил название FBX дозиметра (Ferrous/Benzoic Acid/Xylenol Orange (XO)) [1–3]. В присутствии бензойной кислоты многократно увеличивается радиохимический выход ионов трехвалентного железа, а ксиленоловый оранжевый образует комплексы с этим ионом, что приводит к изменению его оптических свойств, регистрируемому с помощью спектров поглощения в видимом диапазоне. В практике применения FBX дозиметра, однако, до сих пор не предложено стандартного метода анализа, позволяющего получить линейную калибровочную кривую (дозовую зависимость фотометрического сигнала) в достаточно большом диапазоне доз. Это связано с тем, что ксиленоловый оранжевый образует несколько типов комплексов с ионом трехвалентного железа с разными стехиометрическими соотношениями, имеющих различные оптические свойства. Вследствие этого экспериментальные исследования свойств FBX дозиметра и его применение сводятся к эмпирическому подбору длины волны измеряемого фотометрического сигнала (поглощения), которая обеспечивает наилучшую линейную дозовую зависимость.

Для преодоления указанного недостатка FBX дозиметра в данном исследовании разработан теоретический подход и получены выражения для описания зависимости концентраций двух типов комплексов от концентрации иона трехвалентного железа с учетом равновесных констант связывания этих компонентов, а также зависимости концентрации иона трехвалентного железа от поглощенной дозы. Последняя также не является линейной и ограничена концентрацией иона двухвалентного железа в исходном составе. Анализ с помощью предложенного подхода экспериментов по спектрофотометрическому титрованию раствора ксиленолового оранжевого ионами трехвалентного железа позволил рассчитать молярные коэффициенты экстинкции (спектры поглощения) для двух основных типов комплексов $(XO)Fe^{3+}$ и $(XO)_2Fe^{3+}$, а также определить их равновесные константы связывания. Применение этих результатов для анализа спектров поглощения, облученных FBX растворов, позволило определить экспериментально дозовую зависимость концентрации этих комплексов, а также концентрации Fe^{3+} , что позволяет вычислить его радиохимический выход. Анализ дозовых зависимостей концентраций комплексов и их молярных спектров поглощения позволил предсказать наиболее оптимальную длину волны измерения фотометрического сигнала, обеспечивающую линейную дозовую зависимость измерений.

1. Semwal M.K., P.B. Vidyasagar, Ferrous Sulfate–Benzoic Acid–Xylenol Orange Chemical Dosimetry System in Radiotherapy, in: Radiat. Med. Biol., 2017.
2. Polanek R., Varga Z., Fodor E., Brunner S., Szabó E.R., Tőkés T., Hideghéty K., Improved FBX chemical dosimeter system with enhanced radiochemical yield for reference dosimetry in radiobiology and radiotherapy research, Radiat. Phys. Chem. 174 (2020) 108899.
3. Mhatre S.G.V., Adhikari S., Development of new chemical dosimeter for low dose range, Radiat. Meas. 47 (2012) 430–433.

Инфицированные макрофаги линии ТНР-1 для оценки внутриклеточного действия противотуберкулезных препаратов

Котлярова М.С., Армянинова Д.К., Гончаренко А.В.

E-mail: kotlyarova.ms@gmail.com

Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук», Россия

Туберкулез, особенно его лекарственно-устойчивые формы, остается глобальной медицинской проблемой. Возбудитель заболевания, *Mycobacterium tuberculosis* (Mtb), обладает способностью к длительной внутриклеточной персистенции благодаря наличию большого числа факторов вирулентности, которые позволяют бактерии выживать внутри макрофагов, подавляя иммунный ответ [1].

Одной из перспективных стратегий борьбы с туберкулезом является поиск ингибиторов вирулентности, которые не убивают бактерию напрямую, а лишают ее патогенности [2]. Такой подход может снизить темпы развития устойчивости по сравнению с классическими антибиотиками. Взаимодействие патогена с клеткой-хозяином целесообразно изучать *in vitro* на моделях инфицированных клеток. Клеточные модели позволяют тестировать новые соединения, оценивая их эффективность и механизм действия. Комбинация стандартной терапии с ингибиторами вирулентности рассматривается как многообещающий подход для улучшения результатов лечения и преодоления лекарственной устойчивости.

Целью данной работы была разработка модели заражения макрофагов для оценки активности ингибиторов вирулентности против внутриклеточной популяции Mtb

Для создания модели использовали клетки линии ТНР-1, инфицированные штаммом Mtb H37Rv, экспрессирующим флуоресцентный белок mScarlet. Одной из проблем при исследовании Mtb является склонность к агрегации и чрезвычайно медленная скорость роста. Это затрудняет оценку количества микобактерий и, как следствие, усложняет создание одинаковых условий для заражения клеток. Получения суспензии единичных клеток можно добиться путем фильтрования культуры Mtb в стадии экспоненциального роста через фильтр с диаметром пор 5 мкм. Было показано, что полученная суспензия может быть заморожена и использоваться в течение 3 месяцев без изменения свойств.

Для оценки внутриклеточного действия противотуберкулезных препаратов использовали 2 параметра: флуоресценцию mScarlet, отражающую внутриклеточный рост Mtb и сигнал, полученный в результате резазуриновго теста, позволяющий оценить гибель макрофагов.

Было выявлено, что множественность инфекции (соотношение бактерий и макрофагов), а также время индукции дифференцировки клеток ТНР-1 оказывает решающее воздействие на выживаемость макрофагов при инфекции. При этом дозо-зависимое влияние изониазида как на выживаемость микобактерий, так и на выживаемость макрофагов сохраняется. На разработанной модели были подтверждены эффекты ингибитора вирулентности из группы бензотиазолов [3].

1. Bussi C., Gutierrez M.G. *Mycobacterium tuberculosis* infection of host cells in space and time // FEMS Microbiol Rev. 2019 V. 43. No. 4. P. 341-361.
2. Clatworthy A.E., Pierson E., Hung D.T. Targeting virulence: A new paradigm for antimicrobial therapy // Nat. Chem. Biol. 2007. V. 3, No. 9. P. 541–548.
3. Habjan E., Lepioshkin A., Charitou V., Egorova A., Kazakova E., Ho V.Q., Bitter W., Makarov V., Speer A. Modulating mycobacterial envelope integrity for antibiotic synergy with benzothiazoles //Life science alliance. 2024. V. 7. No. 7. P. e202302509.

Оптогенетические инструменты для управления ионными градиентами и уровнем внутриклеточного кальция

Д. Е. Кравцунова¹, С. М. Бухалович¹, А. Д. Власова¹

E-mail: kravtsunova.de@phystech.edu

¹МФТИ, Физтех

Оптогенетика – это междисциплинарная область нейробиологии и биоинженерии, основанная на использовании светочувствительных белков для управления активностью возбудимых и невозбудимых клеток с помощью света. Ключевым преимуществом оптогенетических инструментов является точность и временное разрешение работы, что позволяет сохранить минимум нежелательных вмешательств в физиологические процессы [1].

Традиционным инструментом оптогенетики являются белки родопсины – белки семейства опсинов, связанные с хромофором ретиналем. Под действием света ретиналь изомеризуется (для микробного родопсина чаще всего из all-trans в 11-cis форму), что запускает конформационные изменения в белке. Некоторые родопсины могут осуществлять перенос через мембрану различных ионов: H^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Cl^- .

Объект исследования данной работы – ионы кальция (Ca^{2+} внутри клетки). Согласно современным представлениям, сигнальная система Ca^{2+} характеризуется как сложная высокоточная система кодирования информации, которая интегрирует внешние стимулы и координирует комплексные клеточные ответы.

В работе исследуется возможность управления ионными градиентами с помощью натриевого насоса KR2 (из *Krokinobacter eikastus*) и eNpHR (галородопсин из *Natronomonas pharaonis*) – хлорного насоса [2,3].

Внутриклеточный транспорт ионов исследовали методами конфокальной флуоресцентной микроскопии. Изменение концентрации Ca^{2+} было измерено с помощью генетически-кодируемого флуоресцентного сенсора FGCamp7. Для FGCaMP7 увеличение концентрации Ca^{2+} приводит к возрастанию интенсивности флуоресценции при возбуждении лазером с длиной волны 488 нм и к снижению флуоресценции при возбуждении 405 нм [4]. Динамика внутриклеточной концентрации АТФ отслеживалась с помощью генетически кодируемого сенсора ATeam1.03. ATeam1.03 представляет собой FRET-сенсор, для которого связывание молекул АТФ приводит к увеличению отношения интенсивностей акцепторной флуоресценции на 535 нм и 475 нм при возбуждении лазером с длиной волны 405 нм [5].

В результате работы мы описали динамику кальция и АТФ в цитозоле клетки в ходе оптогенетической индукции работы натриевого насоса (KR2) и хлоридного насоса (eNpHR). Полученный результат ведёт к лучшему пониманию внутриклеточного кальциевого сигналинга и механизмов оптогенетически-индуцированной клеточной гибели.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект "Исследование механизмов оптогенетически-опосредованного запуска кальциевого сигналинга", 24-74-00054).

1. Boyden E. S. et al. Millisecond-timescale, genetically targeted optical control of neural activity //Nature neuroscience. – 2005. – Т. 8. – №. 9. – С. 1263-1268.3
2. Gushchin I. et al. Structure of the light-driven sodium pump KR 2 and its implications for optogenetics //The FEBS journal. – 2016. – Т. 283. – №. 7. – С. 1232-1238.
3. Gradinaru V., Thompson K. R., Deisseroth K. eNpHR: a Natronomonas halorhodopsin enhanced for optogenetic applications //Brain cell biology. – 2008. – Т. 36. – №. 1. – С. 129-139.
4. Barykina N. V. et al. FGCaMP7, an improved version of fungi-based ratiometric calcium indicator for in vivo visualization of neuronal activity //International Journal of Molecular Sciences. – 2020. – Т. 21. – №. 8. – С. 3012.
5. Yoshida T. et al. Application of FRET-based biosensor "ATeam" for visualization of ATP levels in the mitochondrial matrix of living mammalian cells //Mitochondria: Practical Protocols. – New York, NY: Springer New York, 2017. – С. 231-243.

Действие производных диэтиламинофосфония на митохондрии печени крысы и дрожжи аэробного типа обмена

А.П. Кувырченкова¹, Т.Н. Голева¹, М.В. Иващенко², К.Г. Гаев^{1,2}, И.Д. Филатов², А.Г. Rogov¹

E-mail: Kuvyrchenkova_AP@nrcki.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Нарушение равновесия между процессами образования и элиминации активных форм кислорода (АФК) вызывает их патологическое накопление, что ведет к структурным повреждениям клеток и их компонент и развитию окислительного стресса [1]. В качестве защитных агентов против этих процессов применяются антиоксидантные соединения, способные инактивировать свободные радикалы и предотвращать деградацию клеточных структур. Особый интерес представляют митохондриально-направленные антиоксиданты [2].

В представленном исследовании была изучена активность ряда производных диэтиламино- и фенилфосфония на энергетические параметры изолированных митохондрий печени крысы и клетки дрожжей аэробного типа обмена *Yarrowia lipolytica*. Данные вещества представляют собой митохондриально-направленные липофильные катионы с насыщенным углеводородным фрагментом разной длины. Благодаря гидрофобному «хвосту» вещество способно эффективно проникать через мембраны клетки, а положительно-заряженная часть способна накапливаться в митохондриях, за счёт наличия отрицательного заряда на митохондриях [3]. Исследуемые вещества различались по числу замещающих групп и протяженности алифатической цепи. Полученные данные свидетельствуют о том, что исследуемые соединения являлись разобщителями, деполяризующими агентами, не проявляли специфического действия на АТФ-синтазу и снижали скорость образования митохондриями пероксида водорода.

Важно отметить, что выраженность разобщающего эффекта находилась в прямой зависимости от длины алифатической цепи, тогда как способность снижать мембранный потенциал и индуцировать открытие неспецифической митохондриальной поры определялась количеством диэтиламиновых групп.

Все изученные соединения замедляли рост и деление клеток дрожжей *Y. lipolytica* в исследованном диапазоне концентраций. Показана прямая концентрационная зависимость с замедлением роста культуры дрожжей. Стоит отметить, что наиболее сильно ингибировали рост клеток вещества с более длинной алифатической цепью. Вероятно, цитотоксичность объясняется тем, что такие производные лучше проникали в клетки. Показана обратная зависимость цитотоксичности веществ от количества диэтиламиновых групп в молекуле.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИИЦ «Курчатовский институт».

1. Rogov A. G., Goleva T. N., Epremyan K. K., Kireev I. I., Zvyagilskaya R. A. Propagation of Mitochondria-Derived Reactive Oxygen Species within the *Dipodascus magnusii* Cells // Antioxidants. 2021. Vol. 10. P. 120.
2. Shinn L. J., Lagalwar S. Treating Neurodegenerative Disease with Antioxidants: Efficacy of the Bioactive Phenol Resveratrol and Mitochondrial-Targeted MitoQ and SkQ // Antioxidants. 2021. Vol. 10. P. 573.
3. Mironov V.F., Dimukhametov M.N., Nemtarev A.V., Pashirova T.N., Tsepaeva O.V., Voloshina A.D., Vyshtakalyuk A.B., Litvinov I.A., Lyubina A.P., Sapunova A.S., Abramova D.F., Zobov V.V. Novel Mitochondria-Targeted Amphiphilic Aminophosphonium Salts and Lipids Nanoparticles: Synthesis, Antitumor Activity and Toxicity // Nanomaterials (Basel). 2023 T. 13. №. 21 P. 2840.

Цитотоксичность и биологические свойства дендримера Lys2-Gly и его комплекса с C60

И. А. Болгова^{1,2} Е.И. Куликова^{1,2}, А. А. Ганина^{1,2}, И.С. Рябоконь¹, О. И. Большакова¹, И.И. Тарасенко³, С.В. Саранцева¹.

E-mail: elizivkulikova@gmail.ru

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

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

³Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Россия

Современные противоопухолевые препараты характеризуются системной цитотоксичностью, что обуславливает необходимость поиска новых соединений с избирательным действием в отношении опухолевых клеток. Дендримеры являются перспективными молекулами для создания лекарственных средств. Они обладают улучшенной растворимостью в воде, хорошей фармакодинамикой и фармакокинетикой, высокой способностью проникать сквозь клеточные мембраны и транспортировать лекарственные препараты, которые могут быть физически адсорбированы на дендримере или химически пришиты к нему [1]. Фуллерены, обладая уникальными биологическими свойствами, могли бы найти применение при создании противоопухолевых лекарств, но они не растворимы в воде, могут накапливаться в органах и тканях, а растворимые производные фуллеренов часто бывают цитотоксичны [2]. Комплексы или конъюгаты дендримеров с фуллеренами могли бы решить существующие проблемы.

Целью исследования явился анализ цитотоксичности и биологической активности дендримера Lys2-Gly и его комплекса с фуллереном C₆₀

Для анализа использовались линии опухолевых клеток HeLaG63 и HT1080, а также нормальные фибробласты кожи человека – линия DF2. Для определения цитотоксичности применяли МТТ-тест и метод измерения импеданса с помощью технологии xCELLigence. Кроме того, анализировали уровень активных форм кислорода (АФК) после воздействия и продолжительность фаз клеточного цикла для установления причины цитотоксичности.

Как дендример, так и комплекс обладают низкой базовой цитотоксичностью. При увеличении концентрации наблюдалась зависимость эффекта от типа клеток и применяемого соединения. Комплекс Lys2-Gly+C₆₀ проявлял более выраженное подавление метаболической активности, по сравнению с дендримером Lys2-Gly. Наибольшей чувствительностью к соединениям обладали клетки HT1080. В то же время клетки HeLa оказались наименее восприимчивы, что свидетельствует о необходимости учитывать выбор клеточной линии при тестировании новых противоопухолевых препаратов, как важной составляющей. Анализ клеточного цикла показал отсутствие цитостатического эффекта. Не было выявлено достоверной разницы в уровне АФК, указывающей на повышение окислительного стресса.

Таким образом, исследуемые препараты не являются цитостатиками, однако низкая и избирательная цитотоксичность в малых дозах делает эти соединения перспективными для их использования в качестве агентов МРТ или для радио- и фотодинамической терапии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-13-00144).

1. Dias A.P. et. al. Dendrimers in the Context of Nanomedicine. // Int. J. Pharm. 2020. – 573, 118814.
2. Bolshakova O., Zherebyatieva O., Sarantseva S. V. Fullerenes in vivo: toxicity and protective effects // Nanotoxicology. – 2025. – Vol. 19, No. 3. – P. 233–258.

Эндоцитозные пути в интернализации вируса гриппа А

М.Д.Ладыгина¹, М.О.Щепина², Е.А.Варюшина¹ А.Н.Горшков¹

E-mail: maria.ladygina@influenza.spb.ru

¹ФГБУ «НИИ гриппа им. А.А.Смородинцева» Минздрава России, Санкт-Петербург, Россия²ФГБУН «Институт биологии развития им. Н.К.Кольцова РАН», Москва, Россия

Ранние стадии репликативного цикла вируса гриппа А (ВГА) связаны с адсорбцией вируса к клеточной поверхности в результате взаимодействия гемагглютинина с остатками N-ацетилнейраминовой (сиаловой) кислоты на поверхности клеток-мишеней и последующим эндоцитозом адсорбированных вирионов [1]. Известна важная роль клатрин-зависимого эндоцитоза в проникновении ВГА в клетку, при этом также были высказаны идеи о возможном участии других эндоцитозных путей в интернализации ВГА [2,3]. В этой связи, целью нашего исследования являлся анализ вклада различных путей эндоцитоза в инфицирование клеток MDCK вирусом гриппа А штамма A/PR/8/34 (H1N1).

В работе был выполнен электронно-микроскопический (ЭМ) анализ ранних стадий ВГА-инфекции. Методом конфокальной лазерной сканирующей микроскопии (КЛСМ) мы исследовали организацию актинового цитоскелета клеток MDCK при их инфицировании ВГА. Роль клатрин-зависимого эндоцитоза в интернализации вируса была изучена методом КЛСМ в клетках MDCK, сверхэкспрессирующих легкую цепь клатрина, слитую с флуоресцентным белком mKate2 (Евроген, Россия). Кроме того, мы выполнили прижизненную КЛСМ визуализацию флуоресцентно меченого вируса (краситель DiO stain, Abcam) клетками MDCK, окрашенными катионным красителем TMRM (ThermoFisher).

По данным ЭМ, интернализация ВГА в клетки MDCK осуществляется как через окаймленные ямки, так и посредством макропиноцитоза. По данным КЛСМ, в клетках MDCK часть интернализуемых вирионов ассоциирована с кластерами mKate2-клатрина (окаймленными ямками). При этом, попиксельное сравнение интенсивности флуоресценции в двух данных каналах (гемагглютинин, зеленый канал и mKate2-клатрин, красный канал) обнаружило умеренную положительную корреляцию между двумя сигналами (коэффициент корреляции Спирмана $r\text{-Spearman's}=0,48$). Следовательно, часть интернализуемых вирусов не колокализована с окаймленными ямками, и проникает через альтернативные эндоцитозные пути.

КЛСМ анализ организации актинового цитоскелета клеток MDCK в условиях вирусной инфекции (окраска F-актина родамин-фаллоидином) обнаружил, что на апикальной клеточной поверхности F-актин представлен небольшими агрегатами, соответствующими мембранным раффлам. Частичная ассоциация вирионов с этими агрегатами свидетельствует об их интернализации с использованием раффлов (макропиноцитоз).

Прижизненная time-lapse КЛСМ микроскопия обнаружила, что интернализации адсорбированных вирионов предшествует фаза их латерального перемещения (роллинга) по клеточной поверхности к сайтам мембраны с выраженной эндоцитозной активностью, при этом длительность латерального роллинга различается для индивидуальных вирусных частиц.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-24-00306, <https://rscf.ru/project/24-24-00306/>

1. Sempere Borau M., Stertz, S. Entry of influenza A virus into host cells - recent progress and remaining challenges // Curr. Opin. Virol. 2021, V. 48. P. 23–29.
2. Chen C., Zhuang, X. Epsin 1 is a cargo-specific adaptor for the clathrin-mediated endocytosis of the influenza virus // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2008. V.105. No. 33. P. 11790–11795.
3. Edinger T.O., Pohl M.O., Stertz S. Entry of influenza A virus: host factors and antiviral target // J. Gen. Virol. 2014. V. 95. No. 2. P. 263-277.

Использование тестовой установки «Лабиринт Барнс» для оценки пищевого поведения крыс при ропинириновой модели психогенного переедания

Лаухина С.А.¹, Мильшина Е.О.¹, Романова И.Д.¹

E-mail: laukhinasveta@mail.ru

¹ Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева, Самара, Россия

Психогенное переедание, или binge eating disorder (BED) - одно из наиболее распространённых расстройств пищевого поведения и характеризуется повторяющимися эпизодами чрезмерного потребления пищи, сопровождающимися чувством потери контроля и выраженным эмоциональным дистрессом. Распространённость психогенного переедания в общей взрослой популяции составляет в среднем от 0,6 % до 1,0 %.

Стимуляция путей вознаграждения, реализуемая через дофаминэргическую систему, запускает нейробиологическую адаптацию в различных нейронных цепях, что делает поисковое поведение “компульсивным” и приводит к потере контроля над приемом пищи. Повторное употребление вкусных продуктов у восприимчивых людей может вызвать компульсивное потребление пищи, зависимое, в том числе, от дофаминэргической передачи в вентральном полосатом теле и реализуемое через дофаминовые рецепторы D1R и D2R. Некоторые исследования показали, что оптимальное целенаправленное поведение и мотивация коррелируют с повышенной экспрессией D2R в полосатом теле [1, 2].

Несмотря на то, что клинические исследования позволяют описать симптоматику, распространённость и последствия переедания, они не дают возможности проследить причинно-следственные связи между нарушениями в работе мозга, нейротрансмиттерных систем и формированием патологического пищевого поведения. Именно поэтому разработка животных моделей психогенного переедания является особенно актуальной в наше время.

Мы исследовали эффективность использования агониста дофаминовых рецепторов ропинирола в течение 14 суток беспородным самцам крыс, для моделирования психогенного переедания. Эксперимент проводился с использованием тестовой установки “Лабиринт Барнс” в условиях выбора между «убежищем» и пищевой приманкой, размещённой в одной из ложных норок.

Исследование показало, что животные экспериментальной группы, подвергшиеся действию ропинирола, демонстрировали явное компульсивное пищевое поведение в лабиринте Барнс. При воздействии психоэмоционального стрессирующего фактора (яркий свет) крысы проявляли повышение интереса к пище, аналогичное психогенному перееданию у человека. После введения вещества животные экспериментальной группы в тестовой установке, в первую очередь, выбирали пищу, а дальше занимались поиском убежища ($p < 0.01$, по сравнению с контрольной группой, тест Фишера). Животные контрольной группы в аналогичных условиях демонстрировали выраженное оборонительное поведение, выразившееся в приоритетном поиске убежища.

1. Gastelum C., Perez L., Hernandez J., Le N., Vahrson I., Sayers S., Wagner E.J. Adaptive Changes in the Central Control of Energy Homeostasis Occur in Response to Variations in Energy Status // International Journal of Molecular Sciences. – 2021. – Vol. 22, N 5. – P. 2728.
2. Di Segni M., Patrono E., Patella L., Puglisi-Allegra S., Ventura R. Animal models of compulsive eating behavior // Nutrients. – 2014. – Vol. 6, N 10. – P. 4591-4609.

В.А.Лиходедова¹, С.В.Саранцева², Шалагинова И.Г¹

E-mail: thenightecho@yandex.ru

¹*Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Россия*²*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Пролин — это незаменимая протеиногенная аминокислота, играющая роль важной структурной составляющей многих белков и активно участвующая в поддержании кислотно-основного баланса в клетке. [1] На данный момент в результате исследований было показано влияние пролина на широкий спектр клеточных процессов: биоэнергетики, дифференцировки, рост, продолжительности жизни и апоптоз. [2] Биосинтез пролина у человека сопряжён с окислением восстановленных пиридиннуклеотидов (NAD[P]H) посредством активности ферментов, кодируемых генами *ALDH18A1* и *PYCR1*, 2 или 3/L. [3]

Drosophila melanogaster — один из наиболее часто и широко используемых экспериментальных организмов. На данный момент широко признана важность изучения генов дрозофилы для исследования механизмов, лежащих в основе заболеваний человека, так как 197 из 287 известных генов болезней человека имеют гомологи у дрозофилы. [4] Предполагается, что у отряда *Diptera*, к которому относится вид *Drosophila melanogaster*, выработка энергии в летательных мышцах может осуществляться за счёт окисления пролина. [5]

Белок *P5CS*, кодируемый геном *P5CS* у *Drosophila melanogaster* (ортолог *ALDH18A1* у человека), отвечает за катализ синтеза пирролин-5-карбоксилата (*P5C*), который является основным предшественником в биосинтезе пролина. Было показано, что утрата *P5CS* приводит к дефектам организации дыхательной цепи переноса электронов, что вызывает нарушения в общей метаболической сети клетки. [6] Дефицит фермента *P5CS* чаще всего возникает вследствие миссенс-мутаций в кодирующих его генах *P5CS* у *Drosophila melanogaster* и *ALDH18A1* у человека. Нарушение синтеза белка при наличии мутаций в гене *ALDH18A1* у человека приводит к возникновению нейродегенеративных расстройств, характеризующихся дисфункцией мотонейронов и дегенерации аксонов; к таким заболеваниям относится доминантная и рецессивная (типы *SPG9A* и *SPG9B*) формы спастической параплегии. [7]

Как нарушения в работе данного гена влияют на митохондриальную функцию и окислительный стресс клетки на данный момент изучено недостаточно. Разнообразие генетических методов, используемых в исследованиях на модели *Drosophila melanogaster*, позволяет воспроизвести эффекты, вызванные дефицитом фермента *P5CS*, анализ которых будет представлен в докладе.

1. Vettore L. A., Westbrook R. L., Tennant D. A. Proline metabolism and redox; maintaining a balance in health and disease // *Amino Acids*. – 2021. – Т. 53. – №. 12. – С. 1779-1788.
2. Liang X. et al. Proline mechanisms of stress survival // *Antioxidants & redox signaling*. – 2013. – Т. 19. – №. 9. – С. 998-1011.
3. Phang J. M. et al. The proline regulatory axis and cancer // *Frontiers in oncology*. – 2012. – Т. 2. – С. 60.
4. Yamaguchi M., Yoshida H. *Drosophila* as a model organism // *Drosophila model for human diseases*. – 2018. – С. 1-10.
5. Misener S. R., Chen C. P., Walker V. K. Cold tolerance and proline metabolic gene expression in *Drosophila melanogaster* // *Journal of Insect Physiology*. – 2001. – Т. 47. – №. 4-5. – С. 393-400.
6. Pérez-Arellano I. et al. Pyrroline-5-carboxylate synthase and proline biosynthesis: From osmotolerance to rare metabolic disease // *Protein Science*. – 2010. – Т. 19. – №. 3. – С. 372-382.
7. Pérez-Arellano I. et al. Pyrroline-5-carboxylate synthase and proline biosynthesis: From osmotolerance to rare metabolic disease // *Protein Science*. – 2010. – Т. 19. – №. 3. – С. 372-382.

Использование тестовой установки «Лабиринт Барнс» и методики «закапывания шариков» для оценки компульсивного поведения крыс при ропинириловой модели ОКР

Мильшина Е.О.¹, Лаухина С.А.¹, Романова И.Д.¹

E-mail: milshina-katya@mail.ru

¹ Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева, Самара, Россия

Обсессивно-компульсивное расстройство (ОКР) или невроз навязчивых состояний — распространённое психическое расстройство, проявляющееся в непроизвольно возникающих циклических неконтролируемых мыслях (обсессий), которые, в свою очередь провоцируют потребность в многократном выполнении стереотипных действий (компульсий). Обсессии часто создают эмоциональное напряжение, тогда как компульсии служат механизмом кратковременного снижения дистресса.

Люди страдающие ОКР, не могут вести полноценную социальную жизнь. Несмотря на развитие фармакотерапии, около трети больных сохраняют симптомы, устойчивые к лечению [1]. Одной из распространённых моделей ОКР является фармакологическая модель активации центральных дофаминовых рецепторов D₂/D₃ типа, предложенная Шехтманом (1998). Животные, принимающие агонисты D₂/D₃ рецепторов, например, ропинирол, демонстрируют выраженные компульсии, оцениваемые в разных поведенческих тестах [2]. Одним из таких тестов является тест «закапывания шариков». Однако, этот тест чаще используют при однократном введении препарата, а при хроническом введении наблюдается затухание реакции.

Мы исследовали эффективность использования теста «закапывания шариков» и тестовой установки «Лабиринт Барнс» при хроническом введении ропинирола в течение 14 суток беспородным самцам крыс.

Исследование показало, что животные экспериментальной группы, подвергшиеся действию ропинирола демонстрируют явное компульсивное поведение в «Лабиринте Барнс», совершая постоянные проверки ячеек, где ранее, до подмены, находилась приманка или истинное убежище. При этом проверки часто совершались животным уже после нахождения еды в новой ячейке. Через две недели приёма препарата данное поведение стало более выраженным. В первой подмене у экспериментальных крыс количество возвратов к ложной еде увеличилось более чем вдвое ($1,0 \pm 0,36$ до $2,33 \pm 0,21$, $p=0,013$), а к ложной норке почти в 2,5 раза ($1,16 \pm 0,30$ до $2,83 \pm 0,47$, $p=0,018$). При этом возвращения к истинной норке, которые фиксировались на протяжении эксперимента, не отличаются от контроля ($1,0 \pm 0$ против $1,16 \pm 0,16$, $p=0,363$), что указывает на избирательность животных именно в сторону ложных целей. Аналогичная динамика была и в подмене 2: возвраты к ложной норке в эксперименте ($2,50 \pm 0,34$) значительно выше, чем в контроле ($0,83 \pm 0,30$, $p=0,005$).

С другой стороны, тест «закапывания шариков» не демонстрировал усиления компульсивного поведения при пролонгации времени приема ропинирола.

Таким образом, наше исследование показывает, что при использовании хронической дофаминовой модели ОКР в качестве диагностических тестов использование «Лабиринта Барнс» является предпочтительным.

1. David, V. Obsessive-compulsive disorder [Text] / V. David, R. Alison //Clinical review. – 2014. – Vol. 348. – P. 1-6.
2. Szechtman, H. Obsessive-compulsive disorder: Insights from animal models [Text] / H. Szechtman, E. A. Susanne, J. Richard, [et. al.] // Neuroscience & Biobehavioral Reviews. – 2017. – Vol. 76. – P. 254-279.

Гибридный микрофлюидный реактор для выделения белковых структур

Петрова П.Д., Новикова С. П., Вальшина Р., Полидаускайте А.В., Ситков Н. О.

E-mail: sn377911@gmail.com

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

Фактор роста фибробластов-21 (FGF-21) является перспективным терапевтическим белком, связанным с регуляцией метаболизма глюкозы и липидов. Для его лабораторного получения применяется экспрессия в системе *E.coli* с добавлением His-tag, облегчающего очистку. Однако наличие метки снижает биологическую активность и может вызывать иммунный ответ, поэтому требуется её удаление. Одним из наиболее специфичных методов является ферментативное расщепление с использованием TEV-протеазы. Для повышения эффективности данного процесса предложено применение микрофлюидных технологий.

В настоящей работе создан прототип гибридного микрофлюидного ферментного реактора размерами 75×25 мм и максимальным объемом жидкости в каналах 60 мкл. В качестве материалов использованы слои ПММА и ПЭТ, в которых микрофлюидные каналы сформированы методом лазерной абляции и соединены впоследствии с помощью термокомпрессионного связывания. Для подключения к шприцевому насосу изготовлены входные порты методом 3D-печати. Поверхность каналов модифицирована с целью иммобилизации TEV-протеазы тремя методами: с использованием NHS/EDC, CDI и глутарового альдегида. Эффективность иммобилизации контролировалась с применением FITC и красителя Ponceau S.

Изготовленный образец микрофлюидного реактора продемонстрировал стабильность конструкции и химическую стойкость в условиях эксплуатации. Все три метода модификации поверхности позволили добиться адсорбции TEV-протеазы в каналах устройства. При этом метод на основе CDI показал наилучшую стабильность и воспроизводимость по сравнению с NHS/EDC и глутаровым альдегидом. В ходе испытаний была подтверждена возможность ферментативного удаления His-tag из белка FGF-21 в условиях микрофлюидной системы.

Разработанный лабораторный образец гибридного микрофлюидного ферментного реактора обеспечивает эффективную иммобилизацию фермента и может использоваться для очистки рекомбинантных белков, включая FGF-21. Описанная технология открывает широкие перспективы для миниатюризации процессов ферментативной обработки белков, сокращения времени реакции и затрат реагентов, что делает ее актуальной для биомедицинских исследований и прототипирования биосенсорных систем.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-10055).

1. He J. et al. FGF-21 and GDF-15 are increased in migraine and associated with the severity of migraine-related disability //The Journal of Headache and Pain. – 2023. – Т. 24. – №. 1. – С. 28.
2. Byrne M. B. et al. Design considerations for open-well microfluidic platforms for hypoxic cell studies //Biomicrofluidics. – 2017. – Т. 11. – №. 5.

**Повышенное содержание низкоэнтропийных молекул воды – важный индикатор
активных центров белков млекопитающих**

С.А. Панасенко¹, М.Г. Петухов^{1,2}

E-mail: panasenko_s@pnpi.nrcki.ru

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

²*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Взаимодействие белков с лигандами является основой большинства биологических процессов и ключевым аспектом в разработке лекарств. Важнейшую роль в этом взаимодействии играет гидрофобный эффект. Молекулы воды, контактирующие с гидрофобными поверхностями белка, формируют упорядоченные, клатрат-подобные структуры, что приводит к понижению их энтропии [1]. Вытеснение таких низкоэнтропийных молекул воды (НЭВ) в объем растворителя при связывании лиганда сопровождается значительным энтропийным выигрышем, что способствует стабилизации комплекса. Таким образом, количественная оценка распределения НЭВ на поверхности белка — важная задача для понимания механизмов молекулярного распознавания.

На основе имеющихся кристаллографических данных о гидратации белков [2] был разработан вычислительный подход для анализа распределения НЭВ на поверхности белков и проведён сравнительный анализ содержания НЭВ в различных функциональных областях на поверхности 20 белков, представляющих две эволюционно различные группы: 14 белков человека и других млекопитающих, а также 6 белков архей, полная пространственная структура которых получена с высоким разрешением. С помощью разработанного вычислительного подхода были проанализированы три ключевые области поверхности этих белков: активный центр, остальная поверхность белка и карманы, не связывающие лиганды.

Показано, что для обеих групп активные центры характеризуются статистически значимо более высокой долей НЭВ по сравнению с остальной поверхностью белка. Это наблюдение подтверждает, что высокая доля НЭВ в активном центре является общим принципом, во многом определяющим способность белка эффективно связывать лиганды.

Функционально важные различия были выявлены при сравнении известных активных центров с другими структурно подобными карманами в структуре белков. У белков млекопитающих доля НЭВ в активном центре значительно выше, чем в других карманах, что делает эту особенность уникальным индикатором функционально значимого сайта. В то же время у белков архей таких различий не наблюдается: статистически значимой разницы в доле НЭВ между активным центром и другими карманами не выявлено.

Полученные результаты позволяют заключить, что высокое содержание НЭВ в гидратной оболочке активных центров белков млекопитающих, вероятно, является следствием длительного эволюционного пути развития, направленного на повышение эффективности и специфичности их ферментов. У древних белков архей такая высокая специфичность активных центров отсутствует.

Таким образом, характер гидратации активного центра, а именно повышенное содержание в нём НЭВ, во многом определяет способность белков человека эффективно связывать лиганды и может служить критерием для поиска потенциальных сайтов связывания, пригодных в качестве мишеней в процессе разработки новых лекарственных препаратов.

Исследование частично поддержано Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-630).

1. Huggins D.J. Quantifying the entropy of binding for water molecules in protein cavities by computing correlations // *Biophys J.* - 2015. - Vol. 108. - P. 928-936.
2. Nakasako M. Water-protein interactions from high-resolution protein crystallography // *Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci.* - 2004. - Vol. 359. - P. 1191-1204; discussion 1204-1196.

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

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

E-mail: pidyurchina.vn@gmail.com

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Исследование физико-механических свойств композитных криогелей с полимерными микрочастицами

А.В. Позднякова, А.А. Суханова

E-mail: pozdniakovaAV@yandex.ru

Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева,
Красноярск, Россия

Создание конструкций для тканевой инженерии — это важное направление в биотехнологии. Поливиниловый спирт (ПВС) является материалом, способным имитировать различные ткани организма благодаря своим физико-химическим и физико-механическим характеристикам [1]. ПВС может быть физически сшит благодаря процессу криоструктурирования. Результатом такого процесса является криогель. Криогели являются ключевыми материалами в тканевой инженерии и регенеративной медицине благодаря своим уникальным свойствам, которые максимально точно имитируют естественный внеклеточный матрикс (ВКМ). Их механические характеристики можно регулировать для создания каркасов, соответствующих эластичным свойствам широкого спектра мягких тканей [2]. Одним из способов влияния на физико-механические свойства криогелей ПВС является добавление дисперсных наполнителей органической или неорганической природы [3].

Целью данного исследования стало получение композитных криогелей на основе ПВС, наполненных полимерными микрочастицами с депонированным антисептиком бриллиантовым зеленым (БЗ), оценка физико-механических характеристик композитов, исследование *in vitro* в качестве системы доставки антисептика, а также оценка потенциальной цитотоксичности.

Криогели получали методом замораживания-оттаивания. Были изучены пористость криогелей, а также их набухание и деградация. Механические исследования были проведены с использованием динамического механического анализа. Высвобождение препарата исследовали в растворах с различным pH. Антибактериальную активность криогелей определяли в отношении *S. aureus* и *E. coli*. Изучение цитотоксичности и биосовместимости проводили в экспериментах с использованием линии миобластов C2C12.

В зависимости от концентрации микрочастиц модули упругости для композитных криогелей составили от 2,67 кПа до 18,33 кПа. Пористость составила от 15 до 21 %, набухание – от 143 до 213 %, деградация – от 1 до 7 %. Исследование выхода антисептика из композитного материала показало от 41 до 48% выхода БЗ. Зоны ингибирования *S. aureus* составили 14,4 мм, *E. coli* – 9,9 мм. Композитные криогели продемонстрировали отсутствие цитотоксичности, клетки сформировали монослой, равномерно распределенный по поверхности материала.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках госзадания (проект No FEFE-2024-0027).

1. Bercea M. Recent advances in poly (vinyl alcohol)-based hydrogels // *Polymers*. 2024. V. 16. No. 14. P. 2021.
2. Omidian, H. et al. Cryogels: Advancing Biomaterials for Transformative Biomedical Applications // *Pharmaceutics*. 2023. V. 15. P. 1836.
3. Michurov D. A. et al. Cryo-structuring of polymeric systems. Poly (vinyl alcohol)-based cryogels loaded with the poly (3-hydroxybutyrate) microbeads and the evaluation of such composites as the delivery vehicles for simvastatin // *Polymers*. 2022. T. 14. No. 11. P. 2196.

Наноструктурированные покрытия на основе оксида и гидроксида никеля для электрохимического определения уровня лактата в крови

*А.В. Полидауская*¹, *Н.О. Ситков*¹, *И.К. Хмельницкий*¹

E-mail: moonorchard@yandex.ru

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

Создание различных методов контроля и определения уровня лактата в биологических жидкостях, и, в особенности, в крови, является востребованной задачей для современных биомедицинских исследований. Мониторинг лактата позволяет оценить метаболическое состояние организма, а это особенно важно при оценке физических нагрузок [1]. Перспективным направлением является создание неэнзиматических электрохимических сенсоров. В отличие от ферментативных сенсоров, где фермент денатурирует при высоких температурах или изменении pH, со временем уменьшая активность, они не теряют своих свойств в тех же условиях, к тому же являются более устойчивыми для некоторых ингибиторов (аскорбиновая, мочева кислота), а простота конструкции такого сенсора позволяет упростить интеграцию в портативные и носимые устройства.

В качестве активного материала для таких сенсоров высокий потенциал проявляют соединения никеля (NiO и Ni(OH)_2), обладающие достаточно хорошей электрокаталитической активностью в реакции окисления лактата благодаря обратимой окислительно-восстановительной паре $\text{Ni}^{2+}/\text{Ni}^{3+}$ [2]. Относительно других наноструктур использование никеля выглядит перспективным для долговременного и недорогого мониторинга: мезопористый CuO имеет более сложный синтез, но отличается высокой чувствительностью, однако она может зависеть от остатков органических соединений; у Co_3O_4 рабочий потенциал выше, однако, он более токсичен в сравнении с NiO и Ni(OH)_2 .

Морфология полученных покрытий, нанесенных на различные подложки (пластик, стекло, кремний), исследовалась методом растровой электронной микроскопии (РЭМ), которая подтвердила формирование развитой наноструктурированной поверхности с однородным распределением чувствительного слоя: для повышения селективности в наноструктуры вводилась перфторированная катионообменная мембрана (Nafion), обеспечивающая эффективное подавление влияния интерферирующих соединений. Исследования кросс-селективности подтвердили незначительный отклик на добавление потенциальных интерферентов по сравнению с сигналом от лактата.

Разработанные покрытия могут использоваться в задачах, требующих контроля состояния организма, для спортивной и клинической медицины, а также систем персонализированного здоровья.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-10055).

1. Messina L., Giardi M.T. Recent Status on Lactate Monitoring in Sweat Using Biosensors: Can This Approach Be an Alternative to Blood Detection? // Biosensors. 2025. Vol. 15. No. 1. P. 3-6.
2. Kim S. et al. Non-enzymatic electrochemical lactate sensing by NiO and Ni(OH)_2 electrodes: A mechanistic investigation // Electrochimica Acta. 2018. Vol. 276. P. 240–246.

Характеризация препарата на основе моноклональных антител к VEGFR-1

**А.С. Потышева^{1,2}, С.С. Емельянова¹, Л.А. Гараева¹, А.С. Спицына¹, В.В. Кванчиани¹, Н.А. Верлов¹,
А.Л. Коневега^{1,2,3}, Т.А. Штам^{1,3}**

E-mail: potyseva_as@nrcki.pnpi.ru

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

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

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Получение моноклональных антител к различным клеточным рецепторам является актуальной задачей при разработке противоопухолевых терапевтических лекарственных препаратов. Эти молекулы как самостоятельно могут влиять на клеточную пролиферацию, блокируя клеточные рецепторы, так и являться нацеливающими молекулами для различных препаратов, в том числе радиофармацевтических. В данной работе в качестве мишени был выбран рецептор фактора роста эндотелия сосудов VEGFR-1. Он широко представлен на стромальных клетках, которые окружают опухоль и являются клетками нормальной морфологии [1]. Целью работы является характеристика препарата на основе новых моноклональных антител к VEGFR-1.

Для достижения поставленной цели на первом этапе работы были получены и выделены из асцитической жидкости методом аффинной хроматографии мышиные моноклональные антитела к человеческому рецептору VEGFR-1 [2]. На основе последовательности полученных антител позднее были получены генетические конструкции гуманизированных антител к человеческому VEGFR-1, которые затем были очищены методом аффинной хроматографии из кондиционированной среды, трансфецированных плазмидой клеток НЕК293Т. В результате было выделено необходимое количество антител высокой степени чистоты.

На следующем этапе методом иммуоферментного анализа было показано, что все полученные моноклональные антитела, как мышиные, так и гуманизированные обладают высоким уровнем аффинности к человеческому рекомбинантному VEGFR-1. Далее с помощью проточной цитометрии было продемонстрировано связывание тестируемых антител с нативным поверхностным и/или мембранным рецептором VEGFR-1, экспрессия которого была установлена в клетках ряда опухолевых клеточных культур методом ОТ-ПЦР. При оценке пролиферации этих клеточных линий в присутствии в культуральной среде тестируемых антител было показано дозозависимое ингибирование роста клеток *in vitro* при блокировании целевого рецептора антителами [3].

На последнем этапе работы при помощи системы доклинической визуализации люминесценции и флуоресценции LumoTrace FLUO было продемонстрировано биораспределение полученных моноклональных антител. В результате было показано накопление исследуемых антител в индуцированном опухолевом узле *in vivo* и *ex vivo*. Более того полученные моноклональные антитела уменьшают темп роста опухолевого узла *in vivo* и продлевают выживаемость мышей с привитыми опухолями. Полученные результаты с тестируемыми моноклональными антителами указывают на перспективность дальнейших исследований препаратов гуманизированных антител к рецептору фактора роста эндотелия сосудов VEGFR-1.

1. Schwartz J.D., et al. Vascular endothelial growth factor receptor-1 in human cancer: concise review and rationale for development of IMC-18F1. Cancer. 2010. V. 116. № 4 Suppl. P. 1027. DOI:10.1002/cncr.24789
2. Демьянов А.В. и др. Антитела против рецептора фактора роста эндотелия сосудов 1 (VEGFR1) человека. Патент РФ RU 2838680 C1, 2025.
3. Штам Т.А. и др. Оценка ингибирования роста опухолей молочной железы и кишечника при блокировании VEGFR-1 моноклональными антителами // Российские нанотехнологии, 2024, том 19, номер 3, с. 405-412

Применение алгоритмов компьютерного зрения для автоматизации подсчёта яиц чешуекрылых на примере табачного бражника (*Manduca sexta*)

Г.А.Потанов^{1,2}

E-mail: potapov0564@gmail.com

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

²Всероссийский институт защиты растений, Санкт-Петербург, Россия

Подсчёт яиц чешуекрылых, таких как табачный бражник (*Manduca sexta*), является важной задачей при лабораторном культивировании для оценки репродуктивной активности [1]. Традиционные методы ручного подсчёта трудоёмки и подвержены ошибкам. В данном исследовании, проводимом в рамках лабораторного культивирования гусениц, разработан метод на основе модели YOLOv8 в режиме сегментации, упрощающий подсчёт яиц и повышающий эффективность исследований. Telegram-бот позволяет отправлять фото, для автоматического распознавания яиц, что упрощает анализ. Яйца, благодаря овальной форме и чётким контурам, эффективно распознаются моделью [2].

Для задачи сегментации и подсчёта яиц использовалась модель YOLOv8m-seg, которая была обучена на специально созданном датасете, аннотированном в CVAT и преобразованном в формат YOLOv8, включающем изображения яиц с вариациями освещения и плотности. Параметры обучения: 80 эпох, размер изображений 640x640 пикселей, batch=8, patience=50. Аугментация данных (повороты, изменения яркости) обеспечивала устойчивость модели. Реализация выполнена с помощью Ultralytics YOLOv8 [3]. На 74-й эпохе, выбранная как оптимальная, достигнуты метрики детекции: mAP50=0.9794 (97.9% точности в определении местоположения яиц), precision=0.98026 (98% найденных объектов — настоящие яйца), recall=0.96207 (96.2% всех яиц найдены).

Разработанный метод значительно облегчает подсчёт яиц, повышая воспроизводимость данных в исследованиях по культивированию чешуекрылых. Перспективы включают адаптацию метода для других видов и оптимизацию для сложных условий освещения.

1. Загоринский А.А., Горбунов О.Г., Сидоров А.В. Опыт использования искусственных питательных сред для разведения некоторых видов бражников (Lepidoptera, Sphingidae) // Зоологический журнал. 2013. Т. 92, № 7. С. 825–833.
2. Jocher G., Chaurasia A., Qiu J. YOLO by Ultralytics // Ultralytics Documentation. 2023. URL: <https://docs.ultralytics.com/models/yolov8/>
3. Cen X., Lu S., Qian T. YOLO-LCE: A Lightweight YOLOv8 Model for Agricultural Pest Detection // Agronomy. 2025. Vol. 15, No. 9. P. 2022.

Взаимная локализация белков RecN и RecA *E. coli* в нормальных условиях и в процессе SOS-ответа

В.Д. Рощектаева, Н.Е. Морозова, В.Д. Воробьева

E-mail: victoria.rd@yandex.ru

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

Работа направлена на изучение белка RecN *E. coli*. Данный белок является участником SOS-ответа - процесса, который возникает в клетке бактерии в ответ на повреждение ее ДНК. В результате данного процесса участки ДНК могут как точно восстанавливаться, так и приобретать мутации, приводящие к устойчивости к воздействию антибиотиков [1].

Также одним из основных белков SOS-ответа является рекомбиназа RecA, которая играет важную роль в точном восстановлении двунитевых разрывов ДНК.

К настоящему времени были произведены эксперименты по выделению данного белка, а также по изучению его свойств: связывание с ДНК, определение локализации белка в клетке при нормальных условиях и во время SOS-ответа, определение АТФазной активности [2]. Но механизм функционирования белка все еще не был сформирован полностью.

Полученные данные расширяют фундаментальные знания о функциях белка RecN и его влиянии на активность белка RecA. Установление новых деталей реализации и регуляции бактериального SOS-ответа могут способствовать разработке эффективных способов подавления данного процесса с целью борьбы с адаптацией патогенных бактерий к действию антибиотиков, что является одной из важнейших проблем современной медицины. В связи с этим представляется перспективным проведение исследования взаимодействия RecN с белком RecA с использованием современных подходов *in vitro* и *in vivo*.

В работе планируется использовать метод флуоресцентной микроскопии для установления локализации белков RecN и RecA в нормальных условиях и на всех этапах SOS-ответа. К настоящему времени было проведено геномное редактирование для создания штамма *E. coli* с двумя флуоресцентно-мечеными белками RecA и RecN.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ №24-74-00085.

1. Podlesek Z. et al., The DNA Damage Inducible SOS Response Is a Key Player in the Generation of Bacterial Persister Cells and Population Wide Tolerance. / Podlesek Z., Žgur Bertok D. // Front. Microbiol, 2020. — Vol. 11. — P. 1785.
2. Viktoria D. Roshektaeva et al., Features of the DNA Escherichia coli RecN interaction revealed by fluorescence microscopy and single-molecule methods // Biochemical and Biophysical Research Communications, 2024. — Vol. 716. — 150009.

Создание модели *Drosophila melanogaster* для изучения роль С-пептида в развитии поздних осложнений сахарного диабета

А.Р. Сайранова^{1,2}, Е.М. Латыпова¹, С.В. Саранцева¹

E-mail: neferirina@yandex.ru

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

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

Широкое применение *D. melanogaster* в качестве модельного организма обусловлено рядом практических преимуществ, таких как простота лабораторного содержания, высокая плодовитость, короткий цикл развития. Благодаря этому, плодовая мушка используется в разнообразных областях науки от изучения памяти и иммунитета до моделирования и исследования механизмов нейродегенеративных патологий, инфекционных заболеваний и даже алкоголизма [1-5]. В последнее десятилетие *D. melanogaster* стала популярным модельным организмом для изучения метаболических нарушений человека, что обусловлено эволюционной консервативностью ключевых метаболических путей и функциональным сходством органов [6-8].

Целью данной работы является изучение влияния С-пептида на развитие осложнений сахарного диабета на модели *Drosophila melanogaster*. Для решения данной задачи проводили микроинъекции эмбрионов линии №24482 плазмидами для экспрессии проинсулина человека с нативным и укороченным С-пептидами, а также одиночным С-пептидом под контролем конститутивного P(actin 5C) или глюкозозависимого P(dilp2) промоторов. Проколку эмбрионов осуществляли в институте биологии гена РАН (г. Москва). Трансформантов отбирали по изменению цвета глаз.

Нуклеотидная последовательность трансгенов была подтверждена методом секвенирования по Сэнгеру. Для определения сайта интеграции плазмид был использован метод инвертированной ПЦР. Проведенный анализ показал, что полученная нуклеотидная последовательность полностью идентична последовательности известного сайта интеграции M{3xP3-RFPattP} (EF362407.1), расположенного на хромосоме 2R.

Полученные трансгенные линии будут скрещены с линией с нокаутом инсулиноподобных генов dilp2, dilp3 и dilp5 (30889, Блумингтон, США) для изучения влияния С-пептида и инсулина на развитие и прогрессирование хронических осложнений сахарного диабета.

1. McGuire S.E. et.al. Thirty years of olfactory learning and memory research in *Drosophila melanogaster* // *Progress in Neurobiology*. 2005. V. 76. No. 5. P. 328-347.
2. Kim T. et.al. Overview of innate immunity in *Drosophila* // *The Journal of Biochemistry Molecular Biology*. 2005. V. 38. No. 2. P. 121-127.
3. Bilen J. et.al. *Drosophila* as a model for human neurodegenerative disease // *Annual Review of Genetics*. 2005. V. 39. P. 153-171.
4. Dionne M.S. et.al. Models of infectious diseases in the fruit fly *Drosophila melanogaster* // *Disease Model & Mechanisms*. 2008. V. 1. No. 1. P. 43-49.
5. Helfand S.L. et.al. From genes to aging in *Drosophila* // *Advances in Genetics*. 2003. V. 49. P. 67-109.
6. Baker K.D. et.al. Diabetic larvae and obese flies-emerging studies of metabolism in *Drosophila* // *Cell Metabolism*. 2007. V. 6. No. 4. P. 257-266.
7. Alfa R.W. et.al. Using *Drosophila* to discover mechanisms underlying type 2 diabetes // *Disease Models & Mechanisms*. 2016. V. 9. No. 4. P. 365-376.
8. Gálíková M. et.al. Obesity and Aging in the *Drosophila* Model // *International Journal of Molecular Sciences*. 2018. V. 19(7). P.1896-1920

Ассоциация вариантов гена *SCARB2* с активностью лизосомных гидролаз в крови пациентов с болезнью Паркинсона

Е.В. Скударнова^{1,2}, А.И. Безрукова^{1,2}, К.С. Башарова^{1,2}, А.А. Тимофеева², И.В. Милухина³, Е.Ю. Захарова⁴, С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.С. Усенко^{1,2}

E-mail:Skudarnova_Ekaterina@ro.ru

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

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

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

⁴Медико-генетический научный центр им. акад. Н.П. Бочкова, Москва, Россия

Введение. Болезнь Паркинсона (БП) — одно из наиболее распространённых нейродегенеративных заболеваний, патогенез которого связан с нарушением функции лизосом [1]. Согласно данным GWAS, варианты гена *SCARB2*, кодирующего лизосомный мембранный белок LIMP2 — переносчик глюкоцереброзидазы (GCase), ассоциированы с риском БП, что также подтверждено в наших предыдущих исследованиях [2–3]. Однако функциональная роль этих вариантов остается малоизученной.

Цель данного исследования заключалась в оценке ассоциации rs6812193 и rs8475 гена *SCARB2* с активностью лизосомных гидролаз у пациентов с БП в крови.

В исследование было включено 69 пациентов с БП и 93 неврологически здоровых индивидуумов (контроль). Генотипирование rs6812193 гена *SCARB2* проводилось методом ПЦР с рестрикционным анализом, rs8475 *SCARB2* — методом аллель-специфичной ПЦР с TaqMan-зондами. Активности лизосомных гидролаз (альфа-галактозидазы (GLA), галактозилцереброзидазы (GALC), альфа-глюкозидазы (GAA), β-глюкоцереброзидазы (ABG), сфингомиелиназы (ASM), альфа-L-идуронидазы (IDUA)) и концентрации лизосфинголипидов (глоботриаозилсфингозин (LysoGb3), сфингомиелин (LysoSM), гексозилсфингозин (HexSph)) оценивались в крови методом ВЭЖХ-МС/МС.

У пациентов с БП, носителей генотипа ТТ rs6812193, выявлена повышенная активность GALC по сравнению с носителями аллеля С (p=0.03). Носительство генотипа ТТ rs8475 ассоциировалось с повышенной активностью GLA (p=0.014) и повышенной концентрацией HexSph (p = 0.043) по сравнению с носителями аллеля А. В контрольной группе статистически значимых различий не обнаружено (p>0.05).

Впервые показана ассоциация вариантов rs6812193 и rs8475 гена *SCARB2* с активностью ферментов сфинголипидного пути у пациентов с БП. Полученные результаты указывают на возможную вовлеченность гена *SCARB2* в регуляцию сфинголипидного метаболизма, что подчеркивает его потенциальную роль в патогенезе БП.

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

1. Dai, L., Liu, M., Ke, W. et al. Lysosomal dysfunction in α-synuclein pathology: molecular mechanisms and therapeutic strategies. *Cell. Mol. Life Sci.* 81, 382 (2024). <https://doi.org/10.1007/s00018-024-05419-5>.
2. Do CB, Tung JY, Dorfman E, Kiefer AK, Drabant EM, Francke U, Mountain JL, Goldman SM, Tanner CM, Langston JW, Wojcicki A, Eriksson N. Web-based genome-wide association study identifies two novel loci and a substantial genetic component for Parkinson's disease. *PLoS Genet.* 2011(7):e1002141.
3. Usenko TS, Bezrukova AI, Bogdanova DA, Kopytova AE, Senkevich KA, Gracheva EV, Timofeeva AA, Miliukhina IV, Zakharova EY, Emelyanov AK, Pchelina SN. Genetics variants and expression of the *SCARB2* gene in the pathogenesis of Parkinson's disease in Russia. *Neurosci Lett.* 2021;741:135509. doi: 10.1016/j.neulet.2020.135509.

Левитодинамические и оптомеханические методы неdestructивной характеристики биологических объектов

***Е.Э. Слепнёва^{1,2}, Д.А. Глухарёв², М.С. Семенин², Д.П. Щербинин², В.В. Рыбин², А.В. Иванов²,
С.С. Рудый²***

E-mail: slepnyova-liza@yandex.ru

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

² Университет ИТМО, МНОЦ Физики наноструктур, Санкт-Петербург, Россия

Определение физических параметров биологических объектов, начиная от отдельных молекул и заканчивая единичными клетками, всегда являлось актуальной задачей с точки зрения биологии, поскольку любые изменения физических параметров приводят к изменению их функционального состояния [1]. Современные методы биофизических исследований позволяют с высокой точностью определять морфологические, оптические и электрические свойства таких объектов, однако прямое и неdestructивное измерение описанных характеристик по-прежнему остается сложной экспериментальной задачей [2].

К методам неразрушающего исследования свойств микрообъектов относятся методы, основанные на принципах левитодинамики и оптомеханики. Так, электродинамическое и оптическое пленение позволяет стабильно удерживать заряженные микро- и наночастицы, а также проводить оценку их физических параметров посредством анализа характерных траекторий движения. Важно, что данный класс методов позволяет осуществлять одновременный и всесторонний анализ микро- и наночастиц практически неdestructивно [3].

Данная работа посвящена разработке левитодинамических и оптомеханических методов характеристики одиночных биологических объектов на примере клетки HeLa. В работе предложено использование принципа электродинамического пленения для длительной локализации и манипуляции отдельными клетками. Приведено численное моделирование и анализ динамики эластичной структуры одиночной клетки HeLa в ловушке Пауля. Описана методика расчёта массы, заряда и распределения плотности, основанная на анализе спектров трансляционного движения и вращения частицы в ловушке. Обнаружена функциональная зависимость между спектрами трансляционных колебаний, спектрами собственных вращений и физическими характеристиками клетки, локализованной в ловушке. Текучесть мембраны клетки *in vivo* была исследована с использованием техники оптического пленения [4]. Обсуждаются возможности и перспективы применения левитодинамических и оптомеханических методов неdestructивной характеристики биологических объектов.

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

1. Holeček M., Kochová P., Tonar Z. Mechanical Properties of Living Cells and Tissues Related to Thermodynamics // Theoretical Biomechanics. – 2011. – P. 1.
1. Chen Y. et al. Label-free microfluidics for single-cell analysis // Microchemical Journal. – 2022. – V. 177. – P. 107284.
2. Kohli R.K., Davis R.D., Davies J.F. Tutorial: Electrodynamical balance methods for single particle levitation and the physicochemical analysis of aerosol // Journal of Aerosol Science. – 2023. – V. 174. – P. 106255.
3. Li X., Wang Y., Zhang S., et al. Optical tweezers study of membrane fluidity in small cell lung cancer cells // Optics Express. – 2021. – V. 29. – No. 8. – P. 11976–11986.

«Верификация пространственной структуры и монодисперсности белка Cel7465 из Fimbriimonadales методом МУРР»

Смолянова Н.А.¹, Гараева Н. С.^{1,2}, Азбоигба Э.Э.К.², Трахтманн Н.В.², Валидов Ш.З.², Иванов А.И.³, Рогачев А.В.³, Усачев К. С.^{1,2}, Тоцаков С.В.¹, Патрушев М.В.¹, Лаврик И.Н.¹, Юсупов М.М.¹, Гималетдинова А. Э.², Рябов С. А.²

E-mail: smolyanova_natulya@mail.ru

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

² *ФИЦ «Казанский научный центр РАН» Казань, Россия*

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

Разработка новых высокоактивных и стабильных ферментов для переработки растительной биомассы остается актуальной задачей современной биотехнологии. Ферменты, такие как целлюлазы, широко используются в биотехнологической промышленности для гидролиза целлюлозы. Несмотря на широкое применение целлюлаз в промышленном гидролизе целлюлозы, каталитическая эффективность природных ферментов зачастую недостаточна для требований технологических процессов. В этой связи перспективной стратегией является поиск новых ферментов среди экстремофильных микроорганизмов, продуцирующих термостабильные белки, способные функционировать в жестких условиях.

Одним из богатых источников таких ферментов являются метагеномы экстремальных сред, например, гидротермальных источников. При этом ключевыми этапами являются идентификация целевого гена, его клонирование в экспрессионную систему и последующая очистка рекомбинантного белка.

Целью данной работы являлись получение рекомбинантной целлюлазы Cel7465, выделенной из некультивируемого микроорганизма порядка Fimbriimonadales, характеристика ее каталитической активности и анализ пространственной структуры.

Для решения этой задачи был использован метагеномный подход. Согласно этому подходу, сначала был идентифицирован ген cel7465 в метагеномной ДНК, отобранной из термальной скважины Бирагзанг. Ген был амплифицирован и клонирован в экспрессионный вектор pET28a. Экспрессия в клетках *Escherichia coli* позволила получить целевой белок в растворимой форме. Процесс очистки полученного фермента осуществлялся в два этапа: сначала применялась металл-хелатная хроматография с использованием Ni-NTA сорбента, затем следовала эксклюзионная хроматография. In vitro тестирование на карбокси-метил целлюлозе продемонстрировало способность очищенной целлюлазы эффективно функционировать при высоких температурах в различных значениях pH.

Метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) позволил определить глобулярную структуру белка с радиусом инерции (Rg) 21.65 Å. Полученная ab initio модель электронной плотности хорошо коррелирует с предсказанной структурой Cel7465, полученной с помощью алгоритма AlphaFold3 (габаритные размеры ~54×51×50 Å). Совпадение экспериментальных и расчетных данных подтверждает отсутствие агрегации и корректный фолдинг каталитического домена, что свидетельствует о перспективности применения целлюлазы Cel7465 в промышленных биотехнологических процессах.

Исследование выполнено в рамках соглашения № 075-15-2025-012 о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии в целях реализации научного проекта под руководством привлекаемого ведущего ученого.

1. Terpe K. // *Applied Microbiology and Biotechnology*. 2003. V. 60 (5). P. 523. .
<https://doi.org/10.1007/s00253-002-1158-6>
2. Kawaguchi H., Takada K., Elkasaby T. et al. // *Bioresource Technology*. 2022. V. 344. P. 126165.
<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2021.126165>.
3. Debye P., Bueche A. M. // *Journal of Applied Physics*. 1949. V. 20 (6). P. 518.
<https://doi.org/10.1063/1.1698439>.
4. Porod G. // *Kolloid-Zeitschrift*. 1951. V. 124 (2). P. 83. <https://doi.org/10.1007/BF01519615>.

Влияние стрептомицина на инициацию трансляции *in vitro* в зависимости от регуляторных элементов мРНК

З.А. Спиридонова¹, П.С. Касацкий¹, Е.В. Полесскова^{1, 2}, А.Л. Конева^{1, 2, 3},
Д.С. Виноградова¹

E-mail: spiridonova_z@pnpi.nrcki.ru

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

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

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

Трансляция является фундаментальным процессом в живых организмах. Особую роль в нем играет матричная РНК (мРНК), выполняющая роль посредника при переводе генетической информации в белки и выступающая в качестве регулятора данного процесса. В зависимости от функциональных элементов в её структуре мРНК способна существенно влиять на процесс, регулируя уровень экспрессии генов.

Стрептомицин относится к числу наиболее исследованных антибиотиков, мишенью которых является трансляция. Его связывание с малой (30S) рибосомной субъединицей приводит к индукции ошибок декодирования в фазе элонгации. Это вызывает нарушения в синтезе полипептидной цепи и полное ингибирование трансляции [1].

Точный механизм действия стрептомицина на стадию инициации трансляции остается не до конца установленным. Современные исследования демонстрируют влияние стрептомицина на связывание инициаторных факторов (IF1, IF2, IF3) с 30S субъединицей, что, вероятно, объясняет его эффект на начальном этапе трансляции. Антибиотик изменяет структуру декодирующего центра рибосомы, уменьшая аффинность фактора IF1 к 30S субъединице рибосомы [2]. Кроме того, он нарушает взаимодействие между IF1 и IF3, способствуя увеличению расстояния между N- и C-концевыми доменами фактора IF3, тогда как в норме IF1 обеспечивает их сближение в процессе канонической инициации трансляции [3].

В данном исследовании было впервые проанализировано влияние стрептомицина на стадию инициации трансляции в *E. coli* в зависимости от регуляторных элементов мРНК, таких как: длина последовательности Шайна–Дальгарно и ее удаленность от инициаторного кодона, наличие вторичных структур различной устойчивости и локализации, а также присутствие неродственного стартового кодона. Для этого была воспроизведена модельная система прокариотической инициации трансляции [4] в присутствии стрептомицина *in vitro*. Методами флуоресцентной спектроскопии было проанализировано влияние антибиотика на аффинность мРНК в условиях формирования 30S инициаторного комплекса (IC) и на кинетику образования 70S IC в зависимости от ее регуляторных участков и присутствия инициаторных факторов. В результате показано, что стрептомицин оказывает влияние на эффективность формирования 30S IC и 70S IC в зависимости от регуляторных элементов мРНК, а также присутствия IF1 и IF3 в системе.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-74-10088.

1. Demirci H.A., Murphy F., Murphy E. et al. A structural basis for streptomycin-induced misreading of the genetic code // *Nature Communications*. 2013. V. 4. P. 1355.
2. Chulluncuy R., Espiche C., Nakamoto J.A. et al. Conformational Response of 30S-bound IF3 to A-Site Binders Streptomycin and Kanamycin // *Antibiotics*. 2016. V. 5. № 4. P. 38.
3. Milon P., Konevega A.L., Gualerzi C.O. et al. Kinetic checkpoint at a late step in translation initiation // *Molecular Cell*. 2008. V. 30. P. 712-720.
4. Vinogradova D.S., Zegarra V., Maksimova E. et al. How the initiating ribosome copes with ppGpp to translate mRNAs // *PLOS Biology*. 2020. V. 18. № 1. P. e3000593.

Анализ таксономического состава кишечной микробиоты *Drosophila melanogaster* на основе данных секвенирования ампликонов 16S рРНК

**А.А. Стулов^{1,2}, Е.Э. Слепнёва¹, А.Е. Комиссаров¹, Е.А. Иванова¹, Е.В. Рябова¹,
С.А. Булат¹, С.В. Саранцева¹**

E-mail: ant.stulov@gmail.com

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

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

Метагеномика – раздел генетики, изучающий совокупность генов организмов с целью определения таксономического состава и метаболических связей между ними [1]. В настоящее время объектами метагеномных исследований выступают разные сообщества микроорганизмов в различных областях биологии: экологии, медицине, агробиологии, биотехнологии и т.д. Такой подход позволяет исследователю получить данные о таксономическом составе микробиоценоза, недоступные другими методами, так как, большинство микроорганизмов являются некультивируемыми [1].

Одним из перспективных направлений метагеномных исследований является изучение микробиоты животных и человека, в особенности кишечной. Поскольку достоверно известно, что она тесно связана с такими важными физиологическими процессами хозяина, как формирование иммунитета, нормальное функционирование нервной системы, усвоение питательных веществ, защита от патогенов [2]. Существует корреляция между составом микробиоты и развитием патологических состояний кишечника, а также других органов и систем, например, онкологии или аутоиммунных заболеваний.

Одной из распространенных моделей для изучения микробиоты и механизмов её влияния на хозяина является *Drosophila melanogaster*. Это объясняется несложным таксономическим составом её микробиома и хорошей изученностью плодовой мушки как генетической модели. Важным является и факт наличия у дрозофилы большого количества генов-ортологов человека, что позволяет экстраполировать результаты исследований на человеческий организм с необходимым учётом различий.

В данной работе был проанализирован кишечный микробиом самцов дрозофилы, линии Canton-S. Для таксономической классификации использовалась программа QIIME 2 и предобученный классификатор SILVA для результатов ампликонного секвенирования малой 16S субъединицы рибосомальной РНК. Для фильтрации данных использовались встроенные инструменты QIIME 2, а также Cutadapt и Bowtie2. Секвенирование ампликонов проводилось технологией нанопорового секвенирования (Oxford Nanopore – ONT) с использованием прибора MinIon и ячейки 9-й серии. Праймеры для амплификации подбирались к V3-V4 региону гена 16S РНК.

Среди доминирующих родов были выявлены *Providencia* [3] и *Acinetobacter* [4]. Полученные результаты подтверждаются исследованиями, о сосуществовании этих бактерий и дрозофилы. Также обнаруживаются бактерии родов *Lactiplantibacillus* и *Acetobacter*, являющиеся представителями нормальной микробиоты плодовой мушки [4], а также род *Zophobihabitans*, значение которого для дрозофилы на данный момент не изучено.

1. Евгеньевна А.А., Федоровна Б.Н. Метагеномные исследования и диагностика инфекционных заболеваний // Журнал микробиологии, эпидемиологии и иммунобиологии, 2015. № 2.
2. Buyvalenko U. V., Pokrovskaya E. V. Взаимодействие микробиома кишечника и пероральных сахароснижающих препаратов: обзор литератур // Проблемы Эндокринологии, 2022. Т. 68, № 2. С. 66–71.
3. Galac M.R., Lazzaro B.P. Comparative genomics of bacteria in the genus *Providencia* isolated from wild *Drosophila melanogaster* // BMC Genomics. BioMed Central, 2012. Т. 13, № 1. С. 1–18.
4. Brown J.J. и др. Microbiome Structure of a Wild *Drosophila* Community along Tropical Elevational Gradients and Comparison to Laboratory Lines // Appl Environ Microbiol. Appl Environ Microbiol, 2023. Т. 89, № 5.

Особенности культивирования макрофагов М1-поляризации для изучения патогенеза атеросклероза

К.О. Танаянц¹, А.Д. Изюмченко^{1,2}, К.В. Легостаева², К.В. Драчева², С.Н. Пчелина^{1,2}, В.В. Мирошникова^{1,2}

E-mail: tanayantsksenia@yandex.ru

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

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

Макрофаги – клетки иммунной системы, обладающие фенотипической пластичностью и выполняющие широкий спектр функций. Выделяют два основных типа поляризации макрофагов – это классически активированные М1-макрофаги и альтернативно активированные М2-макрофаги. Поляризация макрофагов может меняться в ответ на различные стимулы: М1-макрофаги индуцируют воспаление, уничтожают патогены и могут вызывать повреждения тканей, функция М2-макрофагов заключается в подавлении воспаления, захвате апоптотических клеток и восстановлении тканей. Соотношение субпопуляций макрофагов может влиять на течение воспалительных заболеваний, например, аутоиммунных, аллергических, атеросклероза и др. [1]. Так, по мере развития атеросклеротического поражения наблюдается увеличение количества М1-макрофагов [2], в прогрессирующих бляшках также преобладает субпопуляция М1-макрофагов [3]. Таким образом, М1-макрофаги представляют наибольший интерес для изучения патогенеза атеросклероза.

Целью работы является разработка методики получения первичных культур М1-макрофагов с подтверждением их фенотипа на основе оценки экспрессии маркерных генов с использованием ПЦР в реальном времени.

Для получения первичной культуры макрофагов были выделены и в дальнейшем высажены в чашки Петри моноциты периферической крови. Для дифференцировки моноцитов в М0-макрофаги был использован колониестимулирующий фактор макрофагов (M-CSF, 15 нг/мл). М1-поляризация инициировалась добавлением липополисахарида (ЛПС, 100 нг/мл) и интерферона гамма (IFN- γ , 20 нг/мл) на 5 день эксперимента [4]. Подтверждение М1-поляризации проводили с применением проточной цитометрии (CD16, CD80, CD206) и количественной ПЦР в реальном времени. В качестве генов-маркеров М1-поляризации были использованы *IDO1*, *CXCL10*, М2 – *PPAR γ* , *TGF- β* . Полученные макрофаги характеризовались гиперэкспрессией *IDO1* и *CXCL10* по сравнению с М0, при этом экспрессия генов *PPAR γ* и *TGF- β* , гиперэкспрессия которых характерна для М2-макрофагов, снижалась. Таким образом, ПЦР в реальном времени является удобным инструментом, с помощью которого можно быстро и экономически эффективно контролировать поляризацию макрофагов. Отработанная методика получения макрофагов и контроля М1-поляризации может быть использована в изучении различных аспектов патогенеза атеросклероза.

Работа поддержана грантом РФФИ №25-25-00351.

1. Luo, M. et al. Macrophage polarization: an important role in inflammatory diseases // *Frontiers in immunology*. 2024. V. 15.
2. Bisgaard, L. S. et al. Bone marrow-derived and peritoneal macrophages have different inflammatory response to oxLDL and M1/M2 marker expression - implications for atherosclerosis research // *Scientific reports*. 2016. V. 6.
3. de Gaetano, M. et al. M1- and M2-Type Macrophage Responses Are Predictive of Adverse Outcomes in Human Atherosclerosis // *Frontiers in immunology*. 2016. V. 7.
4. Jaguin, M. et al. Polarization profiles of human M-CSF-generated macrophages and comparison of M1-markers in classically activated macrophages from GM-CSF and M-CSF origin // *Cellular immunology*. 2013. V. 281. No. 1. P. 51-61.

Создание модифицированных бактериофагов для антибактериальной терапии

Е.Р. Тухватуллина¹, Н.Е. Морозова¹

E-mail: tuhvatullina.er@gmail.com

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

Распространение антибиотикорезистентности представляет собой серьезную проблему для современной медицины. Особую актуальность приобретает борьба с патогенными штаммами *Escherichia coli*, которые Всемирная организация здравоохранения включила в перечень приоритетных бактериальных патогенов [1, 2]. В связи с этим, разработка альтернативных методов лечения бактериальных инфекций становится особенно востребованной.

Фаговая терапия, известная еще до открытия антибиотиков, в настоящее время вновь привлекает значительное внимание исследователей как перспективная альтернатива традиционным антибактериальным препаратам. В отличие от подходов, основанных на использовании бактериофагов дикого типа, применение модифицированных фагов открывает возможности для повышения эффективности терапии [3]. Особый интерес представляет создание фаговых векторов, способных доставлять в бактериальные клетки гены, кодирующие токсичные для них белки.

Целью настоящей работы являлось получение модифицированного бактериофага T7, инфицирующего клетки *E. coli* и несущего ген токсичного для этих бактерий белка.

Для осуществления редактирования генома фага T7 с помощью нуклеазы SpCas9 и системы рекомбинации LambdaRed [4] были смоделированы и получены плазмидные векторы, содержащие направляющую РНК с целевым спейсером и матрицу для гомологичной рекомбинации. В область ранних генов бактериофага была встроена конструкция, включающая сильный конститутивный промотор и кодирующую последовательность гена *sulA*, отвечающего за синтез белка-ингибитора клеточного деления. После отбора измененных фаговых частиц была проведена проверка правильности редактирования с помощью секвенирования по Сэнгеру.

Полученный рекомбинантный бактериофаг будет обладать антибактериальной активностью за счет повышенной экспрессии токсичного белка *SulA* в инфицированных клетках *E. coli*.

1. Mousa N. et al. Antibiotic resistance profiles and risk factors of multidrug-resistant *Escherichia coli* in a large tertiary care hospital in a low- and middle-income country. // *Scientific Reports*. 2025. V.15. P.26667.
2. WHO Bacterial Priority Pathogen List, 2024: bacterial pathogens of public health importance to guide research, development and strategies to prevent and control antimicrobial resistance. / Geneva: World Health Organization. 2024. URL: <https://www.who.int/publications/i/item/9789240093461>
3. Cao X. et al. Engineered phages in anti-infection and anti-tumor fields: A review. // *Microbial Pathogenesis*. 2025. V. 198. P. 107052.
4. Isaev A. Editing of Phage Genomes – Recombineering-assisted SpCas9 Modification of Model Coliphages T7, T5, and T3 // *Molecular Biology*. 2022. V. 56. P. 801-815.

Влияние короткоцепочечных жирных кислот на функциональную активность нейтрофилов на примере масляной кислоты

Н.Д. Федорова, Р.А. Ковалёв, Е.Ю. Варфоломеева

E-mail: fedorova_nd@pnpi.nrcki.ru

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

Короткоцепочечные жирные кислоты (КЦЖК) — это метаболиты, которые образуются в результате микробной ферментации пищевых волокон и влияют на метаболизм клеток и противовоспалительные процессы как локально в кишечнике, так и системно. Соли масляной кислоты (например, бутират натрия) увеличивают чувствительность злокачественных клеток к радиотерапии и потенциально могут оказывать антипролиферативное действие на клетки опухолей, благодаря своим свойствам эпигенетических модуляторов [1]. На доклинических моделях показано, что введение КЦЖК, таких как бутират, улучшает состояние при различных воспалительных и аутоиммунных заболеваниях, включая аллергическое воспаление дыхательных путей, атопический дерматит и другие [2]. Ряд работ указывает на роль пищевых волокон и короткоцепочечных жирных кислот (КЦЖК), вырабатываемых в кишечнике, в иммунном гомеостазе и иммунном ответе организма [3].

Нейтрофилы, первыми реагирующие на развитие воспалительного процесса, играют важную роль в защите организма от бактериальных инфекций. Недавние исследования показали, что КЦЖК, образующиеся в микробиоте, влияют на различные виды активности нейтрофилов, включая активацию, миграцию и выработку медиаторов воспалительных процессов [4]. Такие КЦЖК, как бутират натрия, влияют на отдельные аспекты кроветворения в костном мозге, что приводит к накоплению незрелых нейтрофилов [5]. Также было продемонстрировано, что КЦЖК обладают потенциальной терапевтической эффективностью при различных заболеваниях, связанных с дисфункцией нейтрофилов [6].

В данной работе было исследовано влияние короткоцепочечных жирных кислот (масляной кислоты) на развитие реакции респираторного взрыва нейтрофилов периферической крови. Интенсивность реакции респираторного взрыва нейтрофилов периферической крови была оценена с использованием оригинальной проточноцитометрической методики [7]. Было показано изменение способности нейтрофилов периферической крови к генерации активных форм кислорода при взаимодействии с бутиратом натрия.

1. Р. А. Ковалев, Т. А. Штам, Ф. М. Ибатулин [и др.] Возможности противоопухолевой терапии эпигенетической направленности на моделях *in vitro* // Вопросы онкологии. – 2012. – Т. 58, № 6. – С. 800 – 807.
2. Yip W. et al. Butyrate Shapes Immune Cell Fate and Function in Allergic Asthma // *Front Immunol.* 2021 V. 15. №12:628453.
3. D. Parada Venegas et al. Short chain fatty acids (SCFAs)-mediated gut epithelial and immune regulation and its relevance for inflammatory bowel diseases // *Front Immunol.* 2019. V. 10. P. 277.
4. Qingzhu Yan et al. The role and mechanism of action of microbiota-derived short-chain fatty acids in neutrophils: From the activation to becoming potential biomarkers // *Biomedicine & Pharmacotherapy.* 2023. V. 169. 115821.
5. Dang A. Th. et al. Butyrate regulates neutrophil homeostasis and impairs early antimicrobial activity in the lung // *Mucosal Immunology.* 2023. V. 16. №. 4. P. 476 – 485.
6. X. Fu et al. The emerging role of neutrophils in autoimmune-associated disorders: effector, predictor, and therapeutic targets // *MedComm.* 2021. V. 2. №. 3. P.402 – 413.
7. M. Filatov et al. Flow cytofluorometric detection of inflammatory processes by measuring respiratory burst reaction of peripheral blood neutrophils // *Biochem. Mol. Med.* 1995. V. 55. №.2. P. 116 – 121.

Флюороэтилнормемантин – новый блокатор ионотропных глутаматных рецепторов NMDA типа***В.В. Фурман, А.С. Жигулин, О.И. Барыгин***

E-mail: furmanvivi@gmail.com

ИЭФБ РАН, Санкт-Петербург, Россия

Флюороэтилнормемантин (ФЭНМ) – это новое перспективное фторпроизводное мемантина, блокатора поры канала NMDA-рецепторов, используемого для терапии болезни Альцгеймера. Мемантин способен облегчать симптомы этой болезни, однако не излечивать её [1]. Также действие мемантина сопряжено с побочными эффектами, влияющими на синаптическую передачу [2]. Такие особенности мемантина делают необходимым поиск других ингибиторов NMDA-рецепторов, и в частности интересны производные мемантина. ФЭНМ обладает нейропротекторной активностью, которая в некоторых моделях превосходит мемантин по данной характеристике, а также быстрым антидепрессивным действием [3]. В настоящий момент ФЭНМ находится на ранних фазах клинических испытаний в качестве потенциального препарата от нейродегенеративных заболеваний и депрессии [4]. При этом действие ФЭНМ на NMDA-рецепторы на молекулярном уровне до сих пор подробно не было изучено.

При помощи метода локальной фиксации потенциала (patch-clamp) мы изучили основные молекулярные механизмы взаимодействия ФЭНМ с NMDA-рецепторами. Эксперименты проводились на изолированных пирамидных нейронах зоны CA1 гиппокампа в конфигурации «whole cell». Изоляция нейронов из срезов осуществлялась методом вибродиссоциации [5], позволяющим избежать обработки ферментами и сохранить клетки в максимально близком к нативному состоянию. Эксперименты проводились при потенциале на мембране -80 мВ в отсутствие ионов магния, ингибирующих NMDA-рецепторы. Для активации рецепторов использовались 100 мкМ NMDA и 10 мкМ глицина в качестве коагониста.

ФЭНМ обратимо ингибировал токи, вызванные аппликацией агонистов. При анализе концентрационной зависимости действия ФЭНМ (0,3 - 30 мкМ) была определена концентрация полумаксимального ингибирования, равная $6,5 \pm 0,5$ мкМ. ФЭНМ продемонстрировал способность частично оставаться в поро закрытого канала, при этом ни овершутов, ни хвостовых токов, характерных для блокаторов NMDA-рецепторов, препятствующих закрытию канала, не наблюдалось.

Для выявления других особенностей молекулярных механизмов взаимодействия ФЭНМ с NMDA-рецепторами требуются дальнейшие исследования.

1. Tang B. C., Wang Y. T., Ren J. Basic information about memantine and its treatment of Alzheimer's disease and other clinical applications // *Ibrain*. 2023. № 3 (9). С. 340–348.
2. Xia P., Chen H.V., Zhang D., Lipton S.A. Memantine preferentially blocks extrasynaptic over synaptic NMDA receptor currents in hippocampal autapses // *Journal of Neuroscience*. 2010. № 33 (30). С. 11246–11250.
3. Carles A., Freysson A., Guehairia S., Reguero T., Vignes M., Hirbec H., Rubinstenn G. & Maurice T. Neuroprotection by chronic administration of Fluoroethylnormemantine (FENM) in mouse models of Alzheimer's disease // *Alzheimer's Research & Therapy* . - 2025. - №17. - С. 7.
4. Egunlusi A.O., Joubert J. NMDA Receptor Antagonists: Emerging Insights into Molecular Mechanisms and Clinical Applications in Neurological Disorders. // *Alzheimer's Research & Therapy* . - Pharmaceuticals (Basel). - №17(5). - С. 639.
5. Vorobjev V. S. Vibrodissociation of sliced mammalian nervous tissue. // *Journal of neuroscience methods*. 1991. № 2–3 (38). С. 145–150.

Оптимизация адаптированного протокола обработки данных для анализа результатов нанопорового секвенирования бактериальных ампликонов 16S рРНК генов, полученных из древнего льда горы Эльбрус

М.А. Халипова^{1,2}, А.Л. Коневга¹, С.А. Булат¹

E-mail: thymesnell@yandex.ru

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

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

Нанопоровое секвенирование — это перспективный метод «физического» секвенирования нуклеотидных последовательностей [1]. С его помощью можно обрабатывать длинные последовательности и в больших объемах (миллионы прочтений) в реальном времени, но из-за особенностей метода (ошибки при кодировании сигнала и его перекодировка в нуклеотиды – basecalling) для классификации находок используют специальные программы постобработки.

Для классификации данных секвенирования нового поколения, таких как нанопоровое секвенирование, используют готовые автоматизированные протоколы, составляющие биоинформатическое программное обеспечение (ПО) от Oxford Nanopore Technologies (ONT) EPI2ME с различными online протоколами обработки данных. Применение такого ПО обеспечивает быстрый, автоматизированный анализ без предварительной настройки. Однако, невозможность варьирования настроек параметров классификации и выбора актуальных инструментов накладывает ограничения при проведении анализа.

В качестве альтернативы EPI2ME применяются различные альтернативные протоколы, предоставляющие полный контроль над процессом анализа данных нанопорового секвенирования [2]. Вместе с тем существует необходимость оптимизации применения таких протоколов.

В качестве данных для анализа использовали результаты нанопорового секвенирования продуктов амплификации области v3-v4 бактериальных генов 16S рРНК, выделенных из образцов глубокого ледяного керна ледника Эльбрус (глубина 182 м.) в рамках пилотного исследования.

В качестве альтернативного протокола для классификации данных были выбраны следующий [3]: 1) Cutadapt/Seqtk (фильтрация прочтений); 2) Kraken2 (таксономическая классификация); 3) Bracken (уточнение таксономического профилей); 4) Pavian (визуализация результатов). Применение алгоритмов в данной последовательности позволяет повторить протокол EPI2ME «вручную», что дает возможность контроля над каждым этапом анализа.

В результате показано, что выбранный альтернативный протокол демонстрирует ряд преимуществ по сравнению со стандартным протоколом ONT, таких как возможность использовать последнюю версию базы данных (16S_ribosomal_RNA (NCBI) в данном протоколе – за 2025 год, у ONT – за 2023 год), а так же возможность вручную менять параметры и используемые алгоритмы. Также, независимое исследование может в дальнейшем способствовать оценке валидности данных, полученных стандартным методом. При обработке данных пилотного исследования были обнаружены виды, не прошедшие классификацию при обработке стандартным методом, в том числе термофильная бактерия в сегменте, граничащем с зоной возможной вулканической активности, что, однако, требует дополнительной проверки. Работа по оптимизации протокола продолжается.

1. Бородинов А. Г., Манойлов В. В., Заруцкий И. В., Петров А. И., Курочкин В. Е. Поколения методов секвенирования ДНК (Обзор) // НПИ. 2020. No4.
2. Anders Esberg et al., npj Biofilms Microbiomes, Vol. 10, 2024, p.149.
3. Jennifer Lu, Natalia Rincon, Derrick E. Wood, Florian P. Breitwieser, Christopher Pockrandt, Ben Langmead, Steven L. Salzberg, Martin Steinegger Metagenome analysis using the Kraken software suite // Nature Protocols. - 2022. - №17. - С. 2815–2839.

Изучение активности митохондриально-направленных антиоксидантов на дрожжевых моделях нейродегенеративных заболеваний***В.О. Хвастунов, Т.Н. Голева, Х.Х. Епремян, А.Г. Рогов***

E-mail: vadimkhvastunov@yandex.ru

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В последние годы значительно расширились наши представления о роли митохондриальной дисфункции в развитии нейродегенеративных заболеваний. Это понимание открыло новые горизонты в разработке терапевтических подходов, направленных на коррекцию работы митохондрий [1].

В современной медицине особое внимание уделяется митохондриально-направленным соединениям, среди которых особую роль играют ионы Скулачева (SkQ). Эти молекулы представляют значительный интерес для разработки новых методов лечения патологий, обусловленных нарушениями работы митохондрий и повышенным окислительным стрессом.

Настоящее исследование было направлено на всестороннее изучение защитного действия различных митохондриально-направленных соединений. В качестве модельных систем использовались генетически модифицированные дрожжи *Yarrowia lipolytica*, в которых была осуществлена гетерологичная экспрессия белков α -синуклеина и β -амилоида. Такая модель позволяет воспроизводить основные молекулярные процессы, характерные для развития болезни Паркинсона и болезни Альцгеймера [2,3].

В ходе эксперимента были проанализированы следующие параметры – жизнеспособность дрожжевых клеток, устойчивость к окислительному стрессу, антиоксидантная активность исследуемых соединений – ненаправленные антиоксиданты Trolox и N-AC, а также митохондриально-направленные антиоксиданты SkQ1, SkQ3, IOPC3 и IOPC4, оптимальные рабочие концентрации активных веществ.

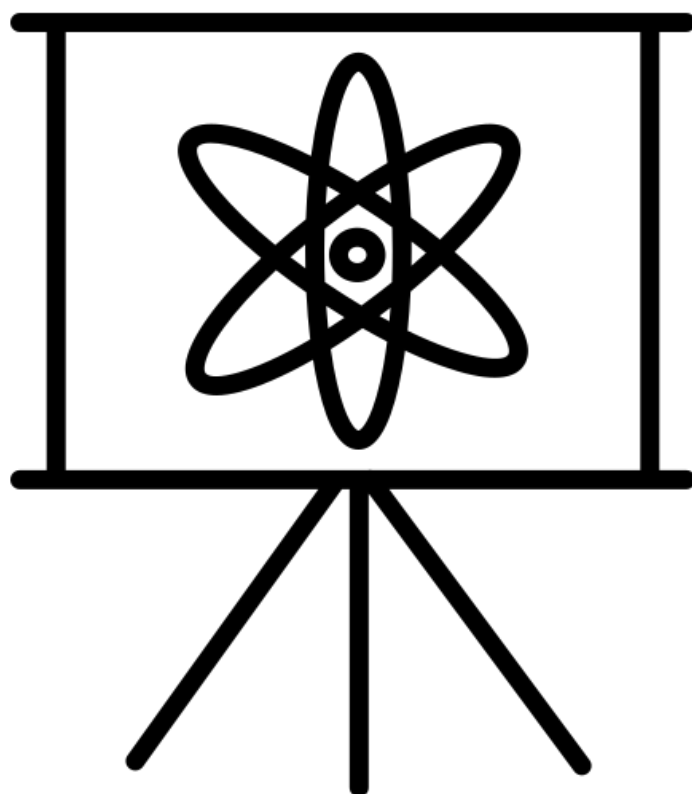
Результаты показали, что среди всех исследованных соединений SkQ3 продемонстрировал наиболее выраженное антиоксидантное действие. Он не только значительно повышал выживаемость дрожжевых клеток, но и существенно уменьшал количество клеток, подверженных окислительному стрессу, до уровня контрольных образцов.

Полученные данные свидетельствуют о том, что дрожжевые модели на основе *Yarrowia lipolytica* являются эффективным инструментом для скрининга митохондриально-активных соединений. Также ионы семейства SkQ обладают высоким потенциалом в качестве соединений, облегчающих митохондриально-связанные нейродегенеративные патологии.

Прогресс в понимании роли митохондриальной дисфункции открывает новые перспективы в лечении нейродегенеративных заболеваний. Развитие митохондриально-направленной терапии представляет собой многообещающее направление в современной неврологии, способное значительно улучшить прогноз и качество жизни пациентов с нейродегенеративными заболеваниями.

1. Klemmensen, M. M., Borrowman, S. H., Pearce, C., Pyles, B., and Chandra, B. (2024) Mitochondrial dysfunction in neurodegenerative disorders, Neurotherapeutics: the journal of the American Society for Experimental NeuroTherapeutics, 21, e00292, doi: 10.1016/j.neurot.2023.10.002.
2. Epremyan, K. K., Rogov, A. G., Goleva, T. N., Lavrushkina, S. V., Zinovkin, R. A., and Zvyagilskaya, R. A. (2023) Altered Mitochondrial Morphology and Bioenergetics in a New Yeast Model Expressing A β 42, International journal of molecular sciences, 24, doi: 10.3390/ijms24020900.
3. Khvastunov, V. O., Goleva, T. N., Epremyan, K. K., and Rogov, A. G. (2024) α -Synuclein Expression Causes Mitochondria Fragmentation and Increased Sensitivity to Oxidative Stress in the Yeast *Yarrowia lipolytica*, Nanobiotechnology Reports, 19, 1016-1022, doi: 10.1134/S2635167624602377.

Теоретическая физика



Анализ чувствительности изотопического сдвига g-фактора связанного электрона для поиска новой физики в водородоподобных ионах***Д.С. Акулов¹, Р.Р. Абдуллин¹, Д.А. Глазов¹***

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

¹*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО», Санкт-Петербург, Россия*

Высокоточные измерения g-фактора связанного электрона в водородоподобных высокозарядных ионах представляют собой один из наиболее чувствительных методов тестирования стандартной модели и поиска новой физики [1,2,3], такой как гипотетическая пятая силы, опосредованная скалярными бозонами. В данной работе проводится анализ неопределенностей в изотопическом сдвиге g-фактора для основного состояния 1S на примере ряда изотопных пар: $\text{He}^{4/6}$, $\text{Ne}^{20/22}$, $\text{Ca}^{40/48}$, $\text{Sn}^{120/132}$, $\text{Th}^{230/232}$.

Основное внимание уделено оценке вкладов и неопределенностей квантово-электродинамических поправок, включая поправки на конечный размер ядра, ядерную отдачу и ядерную поляризацию [4]. Расчеты выполнялись численно путем решения уравнения Дирака в приближении двойного кинетического баланса с потенциалом Ферми для распределения заряда в ядре.

Установлено, что доминирующий вклад в общую неопределенность $\Delta g^{\text{AA}'}$ вносят поправки на конечный размер ядра, обусловленные экспериментальными ошибками в определении среднеквадратичных зарядовых радиусов и моделью ядра. Для тяжелых ионов этот вклад становится подавляющим. Неопределенности, связанные с ядерной отдачей и ядерной поляризацией, на порядок ниже. Анализ чувствительности к константе связи новой физики α^{NB} в рамках модели Хиггсовского портала показывает, что чувствительность метода не возрастает с увеличением атомного номера Z , а снижается из-за растущих неопределенностей, связанных с ядром.

Полученные результаты подчеркивают, что дальнейшее повышение точности поиска новых взаимодействий с помощью изотопического сдвига g-фактора требует улучшения точности экспериментальных измерений ядерных зарядовых радиусов и развития альтернативных методов, таких как метод специальных разностей, позволяющих подавить вклад конечного размера ядра.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, грант № 24-72-10060.

Авторы выражают благодарность Алексею Малышеву за предоставленные результаты по высшим порядкам поправки на ядерную отдачу.

1. Sturm S. et al. High-precision measurement of the atomic mass of the electron // Nature. 2014. V. 506. P. 467–470.
2. Arapoglou I. et al. g-factor of Boronlike Argon 40Ar^{13+} // Physical Review Letters. 2019. V. 122. No. 25. P. 253001.
3. Glazov D.A. et al. g Factor of Lithiumlike Silicon: New Challenge to Bound-State QED // Physical Review Letters. 2019. V. 123. No. 17. P. 173001.
4. Volotka A.V. et al. Nuclear polarization effect in lithiumlike ions // Physical Review A. 2019. V. 100. No. 5. P. 05252.

Интегрируемые уравнения Ландау-Лифшица старшего ранга на основе ассоциативного уравнения Янга-Бакстера

К.Р. Аталиков

E-mail: kantemir.atalikov@yandex.ru

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

Интегрируемые системы – это семейства точно решаемых моделей, описываемые нелинейными дифференциальными уравнениями, включая уравнения в частных производных. Одним из примеров таких уравнений является уравнение Ландау-Лифшица.

Изучается в работе конструкция интегрируемых уравнений типа Ландау-Лифшица в случае $gl(N)$ [1]. Динамические переменные являются элементами матрицы S размера $N \times N$ со свойством $S^2 = \text{const} \cdot S$. Пара Лакса со спектральным параметром строится с помощью квантовой R -матрицы, удовлетворяющей ассоциативному уравнению Янга-Бакстера. Уравнения движения для модели Ландау-Лифшица старшего ранга $gl(N)$ выводятся из уравнений Захарова-Шабата. Модель упрощается, когда $\text{rank}(S) = 1$. В этом случае предлагается гамильтоново описание. Описанное семейство моделей включает эллиптическую модель, происходящую от эллиптической R -матрицы Бакстера-Белавина $GL(N)$. В случае $N = 2$ воспроизводится широко известная эллиптическая пара Лакса Склянина для XYZ уравнения Ландау-Лифшица [2]. Наша конструкция справедлива также для тригонометрических и рациональных вырождений [3, 4] эллиптической R -матрицы.

1. K. Atalikov, A. Zotov, Higher rank 1+1 integrable Landau-Lifshitz field theories from associative Yang-Baxter equation, JETP Letters, 115:12 (2022), 757–762.
2. K. Atalikov, A. Zotov, Field theory generalizations of two-body Calogero–Moser models in the form of Landau-Lifshitz equations, J. Geom. Phys., 164 (2021) 104161.
3. K. Atalikov, A. Zotov, Gauge equivalence between 1+1 rational Calogero–Moser field theory and higher rank Landau-Lifshitz equation, JETP Letters, 117:8 (2023), 630–634.
4. K. R. Atalikov, A. V. Zotov, “Gauge equivalence of 1+1 Calogero–Moser–Sutherland field theory and a higher-rank trigonometric Landau–Lifshitz model”, Theoret. and Math. Phys., 219:3 (2024), 1004–1017.

Скирмионные кристаллы в подходе стереографической проекции**Д.А. Бедяев^{1,2}, В.Е. Тимофеев^{1,2}**

E-mail: dima191819@gmail.com

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

В последние годы особое место в физике конденсированных сред занимают объекты и явления, существенную роль в которых играет топология. Магнитные скирмионы – пример такого объекта [1]. Квазидвумерные топологически нетривиальные вихри локальной намагниченности отличаются от других равновесных конфигураций ненулевым топологическим индексом. Это значит, что магнитный скирмион невозможно непрерывно трансформировать в однородно намагниченное состояние (или магнитную спираль). Известно, что в киральных магнетиках скирмионы могут упорядочиваться в регулярные решётки, т.н. скирмионные кристаллы. Период таких решёток может значительно превосходить период самого кристалла, поскольку характерный размер скирмионов – десятки или сотни нанометров. С практической точки зрения решётки магнитных скирмионов интересны благодаря возможности технологического применения в магнонике, для создания устройств переноса и обработки информации посредством магнонов – элементарных возбуждений локальной намагниченности.

Работа посвящена исследованию фазовой диаграммы нелинейной $O(3)$ сигма-модели с одноосной анизотропией. Статические конфигурации скирмионных кристаллов были построены в подходе стереографической проекции, когда образ мультискирмионной конфигурации может быть представлен в виде стереографических образов отдельных скирмионов [2]. Для моделирования профилей отдельных скирмионов использовался анзац цилиндрического магнитного домена. Было показано, что для анизотропии типа лёгкая ось используемый подход не уступает альтернативным, а полученная фазовая диаграмма качественно и количественно совпадает с результатами других научных групп.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-72-00083.

1. A. A. Belavin and A. M. Polyakov. Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets. Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, 22:245, nov 1975.
2. V. E. Timofeev and D. N. Aristov. Magnon band structure of skyrmion crystals and stereographic projection approach. Phys. Rev. B, 105:024422, Jan 2022.

Calculations of energies, matrix elements, polarizabilities, and corresponding QED corrections for many-electron monovalent atoms and ions

A.A. Bobylev^{1,2}, D.A. Solovyev^{1,2}, T.A. Zalialiutdinov^{1,2}

E-mail: artem.bobyljow@gmail.com

¹*Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia*

²*Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute», Gatchina, Russia*

In present study the applicability of the Dirac-Fock plus Core-Polarization (DFCP) method to atomic calculations is discussed [1]. Calculations of the static electric-dipole scalar and tensor polarizabilities, thermal shifts of atomic levels, hyperfine splitting of the ground state of an atom, as well as the value of the Bethe logarithm [2] are presented. When calculating these values, it is necessary to sum over the intermediate states of the discrete spectrum and integrate over the states of the continuum spectrum. In the case of the Bethe logarithm, the greatest contribution is made by states from the continuum. In precisely solvable problems (e.g., hydrogen-like atoms and ions), calculations can be performed by direct summation over intermediate states, tracking convergence. However, for atoms and ions with several electrons, and even more so for many-electron systems, the task is complicated by the possibility of reproducing the full spectrum of states. To solve this problem, there are various methods used to approximate the interaction potential. In particular, model potentials have become widespread, which are most natural for atoms and ions of the alkaline group of the periodic table (monovalent systems).

Our calculations were performed using the (DFCP) method, which is based on the local version of the Dirac-Hartree-Fock potential [3]. In this approach, the total spectrum, including discrete, continuous, and negative continuum, is replaced by a suitable discrete pseudo-spectrum [4], enabling summation over intermediate states in a manner similar to hydrogen-like systems (the so-called «sum-over-states» method). The pseudo-spectrum is constructed in such a way that several lower positive energy states correspond exactly to the de facto low-lying bound states of the valence electron (the calculated energies are compared with the corresponding experimental values). In doing so, the valence electron is considered in the self-consistent field of the frozen core. Correlation interactions between the core electrons and the valence electron are accounted for by means of the semi-empirical core polarization potential.

The obtained values are compared with the theoretical results obtained in the framework of other approaches, as well as with the corresponding experimental values.

This work is supported by grant from the Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics” BASIS” No. 25-1-2-18-4.

1. Tang Y.B. et al. Calculations on polarization properties of alkali metal atoms using Dirac-Fock plus core polarization method // Chinese Physics B. 2014. V. 23. No. 6. P. 063101.
2. Bethe H. A., Salpeter E. E. Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms // Springer New York. 1977.
3. Shabaev V. M. et. al. QED Corrections to the Parity-Nonconserving 6s-7s Amplitude Cs 133 // Physical review letters. 2005. V. 94. No. 21. P. 213002.
4. Shabaev V. M. et al. Dual kinetic balance approach to basis-set expansions for the Dirac equation // Physical review letters. 2004. V. 93. No. 13. P. 130405.

Ренормгрупповое исследование тензорной модели φ^3

Л.Ц. Аджемян^{1,3}, Д.А. Давлетбаева^{1,2}, М.В. Компаниец^{1,3}

E-mail: st064737@student.spbu.ru

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

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

³Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

В работе исследуется модель, описывающая критическое поведение спиновых стёкол на линии Нишимори, модель Поттса и другие системы [1-3]. Рассматриваемая модель представляет собой статическую тензорную модель на основе теории φ^3 . Её диаграммы могут быть получены из диаграмм скалярной теории φ^3 с учётом соответствующих структурных множителей.

В докладе будут описаны особенности ренормгруппового анализа тензорной модели φ^3 , метод расчета структурных множителей и автоматизация вычислений. Будут рассмотрены полученные результаты.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 25-1-2-48-3).

1. Pierre Le Doussal, A. Brooks Harris. ε expansion for the Nishimori multicritical point of spin glasses // Phys. Rev. B. 1989. V. 40 No. 13. P. 9249-9252.
2. Wiese, K.J., Jacobsen, J.L. The two upper critical dimensions of the Ising and Potts models // J. High Energ. Phys. 2024. 92.
3. Nahum, A., Wiese, K. J. Renormalization group for measurement and entanglement phase transitions // Phys. Rev. B. 2023. V. 108 No. 10. P. 104203.

А.Ж. Зиятдинов¹, С.А. Пастон^{1,2}

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

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

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

Некоторые наблюдаемые эффекты не удастся объяснить в рамках ОТО без введения в рассмотрение темной материи. Можно попытаться избежать ее введения если перейти к модифицированной теории гравитации - теории вложения [1]. В рамках этой теории 4-мерное пространство рассматривается как поверхность, вложенная в 10-мерное плоское пространство Минковского. Оказывается, что имеется возможность переформулировать теорию вложения таким образом, что к действию ОТО добавляется некоторый вклад, описывающий фиктивную материю вложенной гравитации (FMEG). Описывающие эту материю уравнения движения оказываются слишком сложными, поэтому для упрощения анализа используем идею разложения функции вложения в ряд Тейлора на некотором масштабе с учетом до квадратичного вклада. Статические сгущений FMEG возникают только при значениях плотности материи (обычной и фиктивной), которые меньше некоторого критического значения. Среди найденных статических конфигураций возникает "струна" - решение, при котором функция плотности не зависит от одной из координат. Из математической литературы известно, что такое решение является единственно возможным (и при этом радиально симметричным), при условии сходимости интеграла от плотности по поперечной к струне плоскости [2]. Это утверждение удастся усилить: оказывается достаточным потребовать простого убывания функции плотности в поперечных направлениях. Такое уточнение может быть важным, поскольку сходимость интеграла от плотности в физических ситуациях возникает не всегда. Например, для другой найденной статической конфигурации "шар" такой интеграл расходится, и именно такое медленное убывание плотности материи в темном гало галактик и обеспечивает наблюдаемые плоские кривые их вращения.

1. T. Regge and C. Teitelboim. General relativity `a la string: a progress report. In R. Ruffini, editor, Proceedings of the First Marcel Grossmann Meeting, Trieste, Italy, 1975, pages 77 88, North Holland, Amsterdam, 1977.
2. Wenxiong Chen, Congming Li, Classification of solutions of some nonlinear elliptic equations, Duke Mathematical Journal, (1991)

Вычисление зеемановского и сверхтонкого расщепления для водородоподобных ионов с помощью конечного базиса из гауссиан***В.К. Иванов, Д.А. Глазов, А.В. Волотка***

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

Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В атомной физике для численных расчетов широко используется метод конечного базисного набора. Таким методом рассчитываются как квантовомеханические поправки, такие как g -фактор, так и более сложные петлевые квантовоэлектродинамические поправки, такие как поляризация вакуума и собственная энергия электрона. Долгое время стандартным базисом в подобных вычислениях являлся базис из Б-сплайнов [1], однако с помощью этого базиса не удавалось провести вычисления поляризации вакуума. В недавних работах для вычисления поляризации вакуума [2,3] и собственной энергии электрона был применен базис из гауссиан. Хотя этот базисный набор давно известен, в связи с этими недавними работами возник интерес в том, чтобы сравнить точность этого базиса с аналогичными вычислениями с помощью Б-сплайнов. В частности, интересно рассмотреть матричные элементы от различных операторов, таких как оператор взаимодействия с магнитным полем. Такие матричные элементы могут рассматриваться как отдельно, так и возникать при вычислениях в более сложных диаграммах.

В этой работе мы провели вычисление зеемановского расщепления вплоть до второго порядка по магнитному полю, сверхтонкого расщепления и магнитного экранирования с помощью базиса из гауссиан. Результаты мы сравниваем с вычислениями с помощью Б-сплайнов с дуальным кинетическим балансом в случае моделей с конечным размером ядра и с аналитическими формулами для точечной модели. Результаты показывают отличное соответствие между методами. Таким образом, этот базис можно применять и для вычисления более сложных диаграмм, содержащих подобные взаимодействия, например для вычисления поправки от поляризации вакуума для g -фактора.

Исследование выполнено в рамках Федеральной программы поддержки академического лидерства “Приоритет 2030” и при финансовой поддержке фонда «Базис».

1. Johnson, W. R., Blundell, S. A., Sapirstein, J. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines // Phys. Rev. A. 1988. V. 32 No. 2. P. 307–315.
2. Salman M., Saue T. Calculating the many-potential vacuum polarization density of the Dirac equation in the finite-basis approximation // Phys. Rev. A. 2023. V. 108. No. 1. P. 012808.
3. Ivanov V.K., Baturin S.S., Glazov D.A., Volotka A.V. Vacuum-polarization Wichmann-Kroll correction in the finite-basis-set approach // Physical Review A. 2024. V. 110. No 3. P. 032815.

Two-loop self-energy corrections to one-photon recombination process in hydrogen atom**И.А. Кеакоб**

E-mail: st103333@student.spbu.ru

Department of Physics, St. Petersburg State University, Petrodvorets, Oulianovskaya 1, 198504, St. Petersburg, Russia

We present a detailed investigation of two-loop self-energy corrections to the one-photon recombination process in hydrogen, carried out within the framework of relativistic quantum electrodynamics and the SSS -matrix formalism. An explicit analytical expression for the two-photon contribution to the one-photon recombination coefficient is derived. Remarkably, the obtained result is free of singularities, in contrast to the divergent resonant structure characteristic of the two-photon recombination cross section. Numerical computations of the corrected recombination rates into the 1s, 2s, and 3s states, convolved with a Maxwell distribution of free electrons, reveal the temperature dependence and magnitude of the two-loop correction. Incorporating these results into a simplified three-level cosmological recombination model shows a small yet non-negligible impact on the ionization fraction, highlighting the necessity of higher-order QED effects in precision cosmology and motivating future observational advances.

In our earlier work, it was demonstrated that the presence of cascade processes leads to a fundamental distinction between the two-photon width of an excited atomic state and the corresponding two-photon transition rate [1], [2]. Specifically, in [1], considering the bound $ns/nd \rightarrow 1s$ transitions in hydrogen, it was shown that the two-photon widths of the excited states—defined as the imaginary part of the two-loop bound-electron self-energy correction to the energy level—differ from the corresponding two-photon decay rates once one-photon cascade contributions are taken into account. These findings can be consistently interpreted as higher-order radiative corrections to the one-photon decay width.

In the present study, we extend this line of investigation to free-bound processes and analyze the dynamics of two-photon recombination in hydrogen. Within the framework of quantum electrodynamics and the S -matrix formalism, we derive an explicit analytical expression and perform numerical calculations for the radiative corrections to the one-photon recombination cross section and recombination coefficients. Following the methodology developed in [4], we evaluate the imaginary part of the two-loop self-energy operator averaged over continuum wave functions. It is shown that this procedure yields an expression free of resonant terms, which can be consistently interpreted as a radiative correction to the one-photon recombination cross section.

Acknowledgments

This work was supported by the BASIS Foundation, Grant No. 25-1-2-18-3

1. Zalialiutdinov T., Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. Nonperturbative vacuum-polarization effects in the Lamb shift // *Physical Review A*. 2014. V. 89. No. 5. P. 052502.
2. Zalialiutdinov T., Anikin A., Solovyev D. Nonperturbative quantum electrodynamics in the Cherenkov effect // *Physical Review A*. 2020. V. 102. No. 3. P. 032204.
3. Jentschura U.D. Nonperturbative numerical calculation of the one-loop electron self-energy in hydrogenlike systems // *Physical Review A*. 2004. V. 69. No. 5. P. 052118.
4. Solovyev D., Zalialiutdinov T., Anikin A., Triaskin J., Labzowsky L. Nonperturbative quantum electrodynamics of resonant interaction and the laser-induced Lamb shift // *Physical Review A*.

g-фактор возбужденных гелиоподобных ионов**А.А. Кедров^{1,2}, А.Д. Мошкин^{3,4}, Д.В. Зиненко³, Д.А. Глазов^{3,4}**

E-mail: alexandrkedrov@outlook.com

¹Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия³Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия⁴Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Исследования g-фактора многозарядных ионов в последние годы вызывают значительный интерес. К примеру, высокоточные измерения g-фактора [1-4] позволили получить наиболее точное определение массы электрона [4] и обеспечить строгие проверки предсказаний квантовой электродинамики (КЭД) в присутствии магнитного поля [1-5]. Дальнейшее развитие прецизионных экспериментов и теоретических расчётов g-фактора позволят проводить независимые определения постоянной тонкой структуры и ядерных параметров, таких как магнитный момент и распределение заряда [6-8].

Гелиеподобные ионы представляют собой простейшие многоэлектронные системы, что делает их удобными объектами для изучения релятивистских и КЭД эффектов с учетом межэлектронного взаимодействия. В работах [9-11] представлены КЭД расчёты корреляционных поправок к энергии для различных электронных конфигураций гелиеподобных ионов. В настоящей работе рассматриваются поправки на межэлектронное взаимодействие к g-фактору возбуждённого состояния $1s2s$ гелиеподобных ионов.

Полученные результаты откроют дополнительные возможности для тестирования методов квантовой электродинамики и определения фундаментальных констант и параметров ядер.

1. S. Sturm et al. g-factor measurement of hydrogenlike 28Si^{13+} as a challenge to QED calculations // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. No. 030501(R).
2. D. V. Zinenko et al. Electron correlation effects on the g factor of lithiumlike ions // Phys. Rev. A. 2023. V. 107. No. 032815.
3. Heiße F. et al. High-precision determination of g factor and masses of 20Ne^{9+} and 22Ne^{9+} // Phys. Rev. Lett. V. 131. No. 25.
4. S. Sturm et al. High-precision measurement of the atomic mass of the electron // Nature. 2014. V. 506. No. 467.
5. V. P. Kosheleva et al. g Factor of Lithiumlike Silicon and Calcium: Resolving the Disagreement between Theory and Experiment // Phys. Rev. A. 2022. V. 128. No. 103001.
6. Shabaev V.M. et al. g-Factor of Heavy Ions: A New Access to the Fine Structure Constant // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. No. 253002.
7. Yerokhin V.A. et al. g Factor of Light Ions for an Improved Determination of the Fine-Structure Constant // Phys. Rev. Lett. 2016 V. 116. No. 100801.
8. Debierre V. et al. Testing standard-model extensions with isotope shifts in few-electron ions // Phys. Rev. A. 2022. V. 106. No. 062801.
9. A. N. Artemyev et al. QED calculation of the $n=1$ and $n=2$ energy levels in He-like ions // Phys. Rev. A. 2005. V. 71. No. 062104.
10. A. V. Malyshev et al. QED calculations of the $n = 2$ to $n = 1$ x-ray transition energies in middle-Z heliumlike ions // Phys. Rev. A. 2019. V. 99. No. 010501(R).
11. Y. S. Kozhedub et al. QED calculation of electron-electron correlation effects in heliumlike ions // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. No. 062506 (R).

Свободны ли от духов и градиентных неустойчивостей модифицированные симметрично-телепараллельные теории: полный анализ по секторам возмущений

С.А. Климова^{1,2}, А.В. Головнев³, В.П. Вандеев¹, А.Н. Семенова^{1,2}

E-mail: sonia.klim@yandex.ru

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

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

³Центр теоретической физики в Британском университете в Египте, Каир, Египет

В предыдущем исследовании [1] был проведён пертурбативный анализ пятипараметрического обобщения симметрично-телепараллельной теории Newer GR [3] в линейном приближении над пространством Минковского. Нами была получена система линеаризованных уравнений движения и классифицированы степени свободы в тензорном и векторном секторах, что позволило выделить класс моделей, непротиворечащих общей теории относительности (ОТО). В настоящей работе мы фокусируемся на завершающем этапе этого исследования — всестороннем анализе скалярного сектора теории, который ранее не был изучен в полном объёме, а также на проведении анализа моделей на наличие духов и градиентных неустойчивостей во всех секторах возмущений и классификации реалистичных моделей.

Используя развитый ранее формализм, мы исследуем уравнения и свойства их решений для скалярных мод возмущений, после чего классифицируем степени свободы в обобщенном случае теории, а также в случае предела ОТО (STEGR) — для подтверждения состоятельности расширений гравитации как жизнеспособных альтернатив, совместимых с классическими тестами ОТО. Мы показываем, как наложенные ранее ограничения на параметры теории, исключающие появление патологических мод в тензорном и векторном секторах, отражаются на структуре скалярных возмущений.

Отдельное место в работе занимает вопрос устойчивости и свободы от духов моделей во всех секторах теорий. Поэтому для такого анализа была выделена кинетическая часть плотности лагранжиана и получены ограничения на присутствие в теории духов и градиентных неустойчивостей. В результате была получена система линейных дифференциальных уравнений, из которой установлено, какие степени свободы являются динамическими, какие калибровочными, а какие ограничены связями, на основе чего были отобраны физически непротиворечивые и патологические модели.

Ключевым результатом работы является отбор реалистичных моделей, который показал, что потенциально интересными моделями являются: $a_1 = a_2 - a_4 = a_3$, $a_5 = a_1(1 + \epsilon)$ и $a_1 = a_2 - a_4 = a_5$, $a_3 = a_1(1 + \epsilon)$, в которых остается свобода выбора единственного параметра a_3 или a_5 . Этот вывод, подробно изложенный в нашей работе [2], показывает, что перечисленные случаи модификации заслуживают более подробного изучения. Полученные результаты могут быть использованы в астрофизических и космологических приложениях, в которых проявляются отклонения от стандартной теории, а дальнейшие исследования помогут определить роль параметров a_3 и a_5 и их влияние на наблюдаемые эффекты.

1. Климова С.А., Вандеев В.П., Семенова А.Н. Perturbative analysis of a five-parameter symmetrical teleparallel gravitational theory generalization // Сборник тезисов XI Всероссийского молодежного научного форума с международным участием «Open Science 2024». — Гатчина: НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, 2024. — С. 33.
2. Golovnev A., Klimova S., Semenova A. N., Vandeev V. P. Weak Gravity Limit in Newer General Relativity // Universe. — 2025. — Vol. 11. — № 5. — P. 149. — DOI: <https://doi.org/10.3390/universe11050149>.
3. Beltran Jimenez J., Heisenberg L., Koivisto T.S. Coincident General Relativity // Physical Review D. - 2018. - Vol. 98. - P. 044048. - arXiv:1710.03116.

Поправка на собственную энергию к g -фактору: приближенный расчет одно-потенциального вклада в импульсном пространстве.

А.Н. Кочнев, Д.В. Сычко¹, А.В. Малышев

E-mail: st123526@student.spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Данная работа посвящена разработке нового подхода к расчету вклада диаграмм собственной энергии в g -фактор связанного электрона в многозарядных водородоподобных ионах. Актуальность исследования обусловлена тем, что для интерпретации результатов высокоточных экспериментов необходимы не уступающие в точности теоретические значения соответствующих величин. В качестве примера здесь можно привести самое точное определение массы электрона [1], которое стало возможным только в результате совместного теоретического и экспериментального исследований массы электрона.

Диаграммы собственной энергии содержат ультрафиолетовые (УФ) расходимости. Стандартный подход к расчету соответствующих поправок состоит в выделении УФ-расходящихся вкладов путем разложения пропагаторов электрона по степеням взаимодействия с потенциалом ядра. Данные вклады рассматривают в импульсном пространстве, где их можно ковариантным образом регуляризовать и перенормировать. Оставшиеся вклады вычисляют в координатном представлении в рамках парциального разложения, медленная сходимости которого главным образом лимитирует точность расчетов. В работе [2] было предложено рассчитать в импульсном пространстве также являющийся УФ-конечным однопотенциальный вклад. Однако полученные там выражения весьма громоздки, и их не всегда просто вычислить. В данной работе мы предложили ряд приближений для однопотенциального вклада, используя подход изначально сформулированный для вклада одноэлектронной диаграммы собственной энергии в лэмбовский сдвиг [3], а позднее с успехом обобщенный на случай двухэлектронных диаграмм в [4]. В результате получены методы, которые позволяют с высокой точностью вычислять значения вершинной поправки к g -фактору для широкого диапазона зарядов ядра ($Z = 5-79$) и различных атомных состояний ($1s, 2s, 2p_{1/2}, \dots$). Точность расчетов достигает порядка 10^{-12} , что соответствует современным требованиям к прецизионным вычислениям g -фактора в квантовой электродинамике для связанных состояний.

При построении приближения для одно-потенциального вклада, потенциал взаимодействия с ядром переносится из электронной линии в вершины диаграммы, в которых присоединяется фотонная линия. При этом реализована возможность симметричного разнесения частей потенциала сразу в обе вершины диаграммы. Данный подход может найти применение и в расчетах других более сложных диаграмм высших порядков. Полученные результаты открывают новые возможности для исследования квантовоэлектродинамических эффектов в сильных полях и могут быть использованы при интерпретации экспериментов.

1. Sturm S. et al. g -Factor of Hydrogenlike Oxygen $16O^{7+}$ // Physical Review Letters. 2011. V. 107. Art. 023002.
2. V.A.Yerokhin, P.Indelicato, and V.M.Shabaev, Evaluation of the self-energy correction to the g factor of S states in H-like ions // Phys. Rev. A 2004 V.69 Art.052503.
3. Sapirstein J., Cheng K. T. Simplified partial wave expansion of the lamb shift // Physical Review A. 2023. V. 108. Art. 042804.
4. Malyshev A. V., Prokhorchuk E. A., Shabaev V. M. Convergence-acceleration approach to partial wave expansion of two-electron self-energy contributions to the Lamb shift // Phys. Rev. A. 2024. V. 109. Art. 062802.

Теоретическое исследование электронной структуры и свойств кристалла ThF_4 методом подстраиваемого-под-соединение потенциала внедрения

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

E-mail: krasnikova-2004@inbox.ru

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

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

Создание нового стандарта точности измерения времени на основе низкоэнергетического перехода в ядре Th-229 окажут существенное влияние на ряд областей - от более точного определения геолокации электронных устройств до установки более жестких ограничений на значения фундаментальных постоянных. В связи с этим в настоящее время активно ведутся работы по созданию ядерных часов на основе данного изотопа тория. Кроме того, ожидается, что такие часы станут чувствительным инструментом для поиска свойств физики за пределами Стандартной модели.

Один из способов активации метастабильного ядерного состояния $^{229\text{m}}\text{Th}$ включает в себя внедрение Th-229 в твердотельный кристалл, который должен отвечать нескольким требованиям. Во-первых, ширина запрещенной зоны кристалла должна быть больше частоты ядерного перехода. Во-вторых, Th-229 должен располагаться в кристаллической решетке регулярным образом, чтобы избежать дефектов, которые могут нарушить изомерный переход. В работе [1] показано, что подходящим кандидатом является кристалл тетрафторида тория (ThF_4).

В данной работе проводится исследование электронной структуры кристалла тетрафторида тория. Моделирование кристаллической структуры и расчет свойств соединения выполнен с использованием метода «подстраиваемого-под-соединение» потенциала внедрения (compound-tunable embedding potential, СТЕР) [2-5], разработанного в отделе квантовой физики и химии НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ.

Построение внедренных кластеров с СТЕР происходит в три этапа. На первом этапе проводится моделирование электронной структуры кристаллического соединения в рамках расчета с периодическими граничными условиями с использованием методов теории функционала плотности. На втором этапе вырезается основной кластер, который состоит из центрального тяжелого атома и его ближайшего окружения. Далее строится окружение фрагмента так, чтобы воспроизводилась электронная плотность в области вокруг центрального атома до его ближайшего окружения. Третий этап – исследование электронной структуры фрагмента кристалла с СТЕР.

Для кристалла ThF_4 построены кластеры с подстраиваемым-под-соединение потенциалом внедрения и проведен анализ спектроскопических параметров.

1. Zhang, C., von der Wense, L., Doyle, J.F. et al. $^{229}\text{ThF}_4$ thin films for solid-state nuclear clocks // Nature 636, 603–608 (2024).
2. Lomachuk Y.V., Maltsev D.A., Mosyagin N.S., Skripnikov L.V., Bogdanov R.V., Titov A.V. Compound-tunable embedding potential: which oxidation state of uranium and thorium as point defects in xenotime is favorable? // Phys Chem. Chem. Phys. - 2020. Vol. 22. - P. 17922-17931.
3. Maltsev D.A., Lomachuk Y.V., Shakhova V.M., Mosyagin N.S., Skripnikov L.V., Titov A.V. Compound-tunable embedding potential method and its application to calcium niobate crystal CaNb_2O_6 with point defects containing tantalum and uranium // Phys. Rev. B. – 2021. - Vol. 103. - Paper 205105.
4. Shakhova V.M., Maltsev D.A., Lomachuk Y.V., Mosyagin N.S., Skripnikov L.V., Titov A.V. Compound-tunable embedding potential method: Analysis of pseudopotentials for Yb in YbF_2 , YbF_3 , YbCl_2 , and YbCl_3 crystals // Phys. Chem. Chem. Phys. - 2022. - Vol. 24. - P. 19333-19345.
5. Maltsev, D., Lomachuk, Y., Shakhova, V. et al. Electronic structure study of YNbTiO and CaNbO with actinide impurities using compound-tunable embedding potential method // Sci Rep 15, 10645 (2025).

Улучшенные методы прецизионного расчета диаграммы собственной энергии связанного электрона

Е.О. Лазарев¹, М.А. Рейтер², Д.А. Глазов^{1,3}, А.В. Малышев^{2,3}

E-mail: egor.lazarev@metallab.ifmo.ru

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

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

³Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Прецизионная спектроскопия открывает широкие возможности для поиска Новой физики и сверхточной проверки существующих теорий. Одной из самых точных теорий на данный момент считается квантовая электродинамика (КЭД). Экспериментальные методы стремительно улучшаются, и их согласие с теоретическими предсказаниями возрастает. Так в последние годы экспериментальная чувствительность к g фактору достигла 10^{-13} [1], что стало превышать текущую точность расчётов однопетлевых поправок. В связи с этим появляется задача улучшения существующих методов, которые в дальнейшем могут быть использованы для расчёта поправок, отвечающих более сложным диаграммам.

В КЭД для связанных состояний оказывается значительно сложнее перенормировать массу электрона, чем в свободной КЭД. Современный подход к перенормировке и расчёту диаграммы собственной энергии (СЭ) связанного электрона опирается на потенциальное разложение [2,3]. Его суть — в разложении пропагатора связанного электрона по теории возмущений по кулоновскому потенциалу ядра. Отдельно рассматривая вклады со свободным пропагатором и с одним взаимодействием с ядром, можно ковариантно регуляризовать сократить все возникающие ультрафиолетовые расходимости, и затем вычислить их конечные части в импульсном представлении. Однако оставшаяся часть разложения, многопотенциальный вклад, рассчитывается в координатном представлении, представляя собой бесконечный ряд в разложении по парциальным волнам. Основная погрешность вычисления диаграммы СЭ заключается в экстраполяции данного медленно сходящегося ряда.

Для увеличения точности в последние годы используются разностные ускорительные схемы. Их суть заключается в вычислении ещё одной диаграммы в координатном и импульсном представлениях: $\Delta E^{\text{Mp}} = (\Delta E^{\text{Mp}} - \Delta E^{\text{Sub}})_x + \Delta E^{\text{Sub}}_p$. Таким образом, требуется только экстраполяция разности $(\Delta E^{\text{Mp}} - \Delta E^{\text{Sub}})_x$. На практике данная разность сходится лучше, и поэтому точность оказывается выше. В частности, схема Сапирштейна и Ченга [4] позволяет получать результаты на 1–2 порядка точнее.

В данной работе предлагается произвести ещё одну оптимизацию, основанную на анализе асимптотического поведения данных рядов. Используя описанную ранее разностную схему, перед вычитаемым слагаемым вводим новый параметр. В силу того, что разность $(\Delta E^{\text{Mp}} - \Delta E^{\text{Sub}})_x$ убывает как $1/k^2$, и ΔE^{Mp} — как $1/k^2$, где k — число членов ряда, оказывается, что выбором параметра перед вычитаемым слагаемым можно полностью сократить эту асимптотику. Итоговая точности экстраполяции улучшается еще на 1–2 порядка.

Работа выполнена в рамках Федеральной программы поддержки академического лидерства “Приоритет 2030”.

1. Sailer T. [et al.]. Measurement of the bound-electron g -factor difference in coupled ions // *Nature*. — 2022. — Т. 606, № 7914. — С. 479–483.
2. Snyderman N. J. Electron radiative self-energy of highly stripped heavy atoms // *Annals of physics*. 1991. — Т. 211, № 1. — С. 43–86.
3. Yerokhin V., Shabaev V. First-order self-energy correction in hydrogenlike systems // *Physical Review A*. — 1999. — Т. 60, № 2. — С. 800.
4. Sapirstein J., Cheng K. Simplified partial wave expansion of the Lamb shift // *Physical Review A*. — 2023. — Т. 108, № 4. — С. 042804.

Multipole decomposition of the thermal one-loop self-energy correction of the bound electron: TQED theory of the one-electron atom

J. Lopez¹, D. Solovyev^{1,2}, T. Zalialiutdinov^{1,2}, P. Kvasov¹ and A. Bobylev^{1,2}

E-mail: josueloprod@hotmail.com

¹Department of Physics, St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

²Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institut», Gatchina, Russia

A theoretical description of atom interaction with blackbody radiation (BBR) was given by W. Farley and W. H. Wing in [1]. It was shown that the main effects are caused by the off-resonance and resonance components of the BBR. The resonant components of the BBR induce electric-dipole transitions to other atomic energy level, and the off-resonance components induce a dynamic Stark shift. Further discussions and evaluations is carried out for the off-resonant contributions of the BBR. An analitcal derivation of the ac Stark shift within the framework of QED theory at finite temperature was given recently in [2]. In particular, in the leading order, the energy shift was obtained as the real part of the one-loop self-energy correction for the bound electron, and the thermal broadening emerged as the corresponding imaginary part. Since the thermal Stark effect is defined by the dipole polarizability of the atom, at leading order such a shift is independent of the hyperfine quantum numbers and thus does not contribute to HFS measurements. As a consequence, the search for the influence of the thermal environment on hyperfine transitions is reduced to next order effects and in particular to the thermal magnetic shift (thermal Zeeman shift, BBRZ)[4]. Taking into account laboratory conditions we mainly focus on the energy shifts and BBR-stimulated widths at room temperature $T = 300$ K, implying its application to spectroscopic experiments.

Within the finite temperature QED approach, we analyse the thermal one-loop self-energy correction for the atomic electron in the one-electron approximation. The BBR induced effects are derived from one-loop self-energy correction within the S-matrix formalism. Utilising the procedure given in [2], we investigate the influence of a thermal equilibrium on atomic systems. This reveals well-known effects, including the thermal Stark and Zeeman shifts, along with the quadrupole thermal interaction and relativistic corrections to the multipole expansion of photon field operators. We demonstrate that these contributions emerge from the expansion of the fully relativistic expression, derived in this work, in terms of the parameter αZ . This leads to corrections of the well-known quantum-mechanical (QM) expressions for dynamic polarizabilities.

The numerical results obtained in the calculation of the thermal Stark shift at temperature of 300 K for various ns states of the hydrogen atom are presented, as well as results for a thermal correction of relativist nature for the thermal Stark shift. Our results can be compared with those of [1, 2]. The present study also provides a rigorous derivation of the thermal Zeeman shift within the one-loop formalism of the TQED approach. Numerical results of the BBRZ shift for several hyperfine sublevels in the hydrogen atom are also given and they can be compared with those obtained previously in [3] and [4]. Finally, the work presents analytical expressions and numerical calculations for the widths and partial transition probabilities induced by thermal radiation.

1. Farley W., Wing H. Accurate calculation of dynamic Stark shifts and depopulation rates of Rydberg energy levels induced by blackbody radiation. Hydrogen, helium, and alkali-metal atoms // *Physical Review A*. — 1981. — Vol. 23. — P. 2397.
2. Solovyev D., Labzowsky L., Plunien G. QED derivation of the Stark shift and line broadening induced by blackbody radiation // *Physical Review A*. — 2015. — Vol. 92. — P. 022508.
3. Itano M., Lewis L., Wineland D. Shift of 2 S1/2 hyperfine splittings due to blackbody radiation // *Physical Review A*. — 1928. — Vol. 25. — P. 1233.
4. Z.-M. Tang, Y.-F. Wei, B. K. Sahoo, C.-B. Li, Y. Yang, Y. Zou, X.-R. Huang. Blackbody-radiation Zeeman shifts in optical clocks: The role of fine-structure intramanifold resonances // *Phys. Rev. A*. — 2024. — Vol. 110. — P. 043108.

Связанная динамика магнитных вихрей в одинаковой и разной полярности в трехслойной (ферромагнетик/проводник/ферромагнетик) цилиндрической наноструктуре

Т.А. Лукошкина¹, Д.Ф. Нерадовский¹, Е.Г. Екомасов², Р.А. Фасхутдинов²

E-mail: t.a.lukoshkina@utmn.ru

¹Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Рассматривается связанная динамика магнитных вихрей в трёхслойном двухвихревом спин-трансферном наноосцилляторе (СТНО). Известно, что для описания нелинейной динамики векторов намагниченности в каждом из ферромагнитных слоев используется обобщенное уравнение Ландау-Лифшица [1]. Для упрощенного описания движений связанных вихрей в рамках метода коллективных координат можно получить систему уравнений Тиля [2]. Чтобы рассмотреть движение вихрей с различными полярностями, необходимо учесть магнитное взаимодействие их ядер. Полученная система уравнений Тиля для координат центров вихрей приводится к стандартному виду с последующим обезразмериванием и решается численно. При определенном соотношении получившихся безразмерных параметров, входящих в уравнения, можно получить стационарный (установившийся) режим движения вихрей. Получившиеся спектры частот отличаются от линейного случая, который не учитывает магнитное взаимодействие между ядрами вихрей.

1. Исследование влияния толщины немагнитного слоя на связанную динамику магнитных вихрей в спин-трансферном наноосцилляторе / Е.Г. Екомасов, Д.Ф. Нерадовский, М.И. Фахретдинов, В.Н. Назаров // Челябинский физико-математический журнал, – 2025. – Т. 10, № 2. – С. 227–235.
2. Thiele A.A. Steady-State Motion of Magnetic Domains // Physical Review Letters, 1973. – Vol. 30, No. 6. – P. 230-233.

И.А. Мусеев¹², О.Ю. Андреев¹²

E-mail: st095785@student.spbu.ru

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

Актуальность изучения кристаллических структур обусловлена их широким применением как в экспериментальных исследованиях, так и в технических задачах, при этом ключевое значение имеют локальные особенности кристалла, способные существенно влиять на макроскопические свойства материала.

В рамках данной работы для моделирования таких особенностей в кристалле ксенотима (YPO_4) был использован кластерный подход, работающий с малой частью решётки, что позволяет применять молекулярные программные пакеты для описания кристалла.

Одним из примеров экспериментального подхода к исследованию локальных свойств кристалла является определение локальной намагниченности кристалла при помощи μSR -метода [1]. Он позволяет определять магнитное поле в областях, где закрепляется антимюон, захваченный кристаллом, создавая этим потребность в определении устойчивых положений антимюона в кристалле.

Целью работы являлось определение областей локализации антимюона (без электрона и с захваченным электроном) в кристалле, а также получение колебательного спектра кристаллической решётки.

Электронная структура описывалась в рамках теории функционала плотности (DFT) [2] с использованием эффективных потенциалов остова (ЕСР) [3] для атомов иттрия. В качестве «реальных» атомов выступали одиннадцатиелектронный иттрий и полноэлектронные фосфор и кислород. Кластер $\text{Y}_5(\text{PO}_4)_{18}$ был помещён в кристаллическое окружение с помощью эмбединга с использованием потенциала внедрения (СТЕР) [4]. СТЕР реализовывался при помощи программы Crystal основываясь на трёх электронном ЕСР иттрия.

Благодаря исследованию посредством построения потенциальных энергетических поверхностей были определены устойчивые положения антимюона в кристалле. В результате построения колебательных спектров атомов решётки, было показано, что наиболее чувствительной к добавлению антимюона в кристалл оказывается область низких частот.

Разработанный подход применяется также для моделирования кристалла RuO_2 и исследования областей локализации захваченного мюона в μSR -эксперименте.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ и СПбНФ № 25-23-20046.

1. Yaouanc A., Dalmas de Reotier P. Muon spin rotation, relaxation, and resonance: Applications to condensed matter // Int. Ser. Monogr. Phys. 2011. V. 147. P. 1-486.
2. Adamo C., Barone V. Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The pbe0 model // The Journal of Chemical Physics. 1999. V. 110. No. 13. P. 6158-6170.
3. Mosygin N. S., Titov A. V. Generalized relativistic effective core potential // International Journal of Quantum Chemistry. 1999. V. 71. P. 359-401.
4. Lomachuk Y. V., Maltsev D. A., Mosyagin N. S., Skripnikov L. V., Bogdanov R. V., Titov A. V. Compound-tunable embedding potential: which oxidation state of uranium and thorium as point defects in xenotime is favorable? // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V. 22. P. 17922-17931.

Analysis of relativistic effects for correlation correction in highly charged ions***A.D. Moshkin^{1,2}, D.A. Glazov^{2,3}, A.V. Malyshev^{1,3}, A.V. Volotka², D.V. Zinenko¹***

E-mail: st086491@student.spbu.ru

¹ Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia² ITMO University, Saint Petersburg, Russia³ Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute», Gatchina, Russia

Highly charged ions serve as an exceptional platform for testing bound-state quantum electrodynamics (BS-QED) [1-3]. A prominent example is the investigation of the Lamb shift in lithium-like uranium [4]. In recent years, experimental precision in measuring the g factor of hydrogen-, lithium-, and boron-like ions has reached the level of 10^{-9} — 10^{-11} [5-12]. These studies have led to the most accurate determination of the electron mass [13, 14] and enabled stringent tests of relativistic nuclear recoil effects in the presence of magnetic field [7, 11]. Further progress in both theoretical and experimental approaches to g factor measurements opens the possibility for independent determinations of the fine-structure constant, nuclear parameters, and the exploration of physics beyond the Standard Model [15-17]. This progress also paves the way for exploring QED effects in the strong coupling regime, going beyond the Furry picture [17-20].

In this work, we investigate correlation effects within both the Coulomb and various screening potentials. We first analyze the convergence of the perturbation series for energies depending on the zero approximation potential. In this analysis, both helium-like and lithium-like ions are considered in their ground and excited states. Next, we derive a second-order relativistic expansion for energies of lithium-like ions in the ground $(1s)^2 2s$ and excited $(1s)^2 2p_{1/2}$ and $(1s)^2 2p_{3/2}$ states within rigorous QED framework. This energy correction provides a valuable testing ground for developing and benchmarking computational methods prior to their application to the g factor calculation. Subsequently, we examine the convergence properties of the perturbation theory and derive a relativistic expansion for the g factor. The analysis of these expansions, combined with high-precision non-relativistic calculations [21], is expected to improve the theoretical accuracy of g factor prediction.

This research was supported by the Russian Science Foundation Grant № 23-62-10026

1. Volotka A.V. et al. // Ann. Phys. 2013, 525, 636.
2. Sturm S. et al. // Phys. Rev. A. 2013, 87, 030501.
3. Shabaev V.M. et al. // J. Phys. Chem. Ref. Data 2019, 44, 031205.
4. Shabaev V.M. // Phys. -Usp. 2008, 51, 1175.
5. Sturm S. et al. // Phys. Rev. Lett. 2011, 107, 023002.
6. Wagner A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2013, 110, 033003.
7. Köhler F. et al. // Nat. Commun. 2016, 7, 10246.
8. Arapoglou I. et al. // Phys. Rev. Lett. 2019, 122, 253001.
9. Glazov D.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2019, 123, 173001.
10. Micke P. et al. // Nature 2020, 587, 60.
11. Morgner J. et al. // Nature 2023, 622, 53.
12. Heiße F. et al. // Phys. Rev. Lett. 2023, 131, 25.
13. Sturm S. et al. // Nature 2014, 506, 467.
14. Tiesinga E. // Rev. Mod. Phys. 2021, 93, 025010.
15. Shabaev V.M. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006, 96, 253002.
16. Yerokhin V.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2016, 116, 100801.
17. Debierre V. et al. // Phys. Rev. A 2022, 106, 062801.
18. Malyshev A.V. et al. // JETP Lett. 2017, 106, 765.
19. Shabaev V.M. et al. // Phys. Rev. Lett. 2017, 119, 263001.
20. Kosheleva V.P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2022, 128, 103001.
21. Yerokhin V.A. et al. // Phys. Rev. A. 2017, 95, 062511.

Сверхструктуры на основе краевых геликоидальных состояний 2D топологического изолятора***Р.А. Ниязов^{1,2}, Д.Н. Аристов^{1,2}, В.Ю. Качоровский²***

E-mail: niyazov_ra@npri.nrcki.ru

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*²*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Топологические изоляторы (ТИ) – перспективный класс материалов, обладающих диэлектрическим объемом и проводящими краевыми состояниями. Эти геликоидальные краевые состояния (ГКС) топологически защищены: электроны с разными спинами движутся в противоположных направлениях без обратного рассеяния на примесях. Это свойство открывает путь к созданию энергоэффективных устройств электроники и спинтроники нового поколения.

В данной работе было проведено теоретическое исследование управляемых метаматериалов (сверхструктур) на основе периодических решеток из туннельно-связанных колец ГКС – так называемых «геликоидальных кристаллов» (ГК). Такие структуры реализуются экспериментально путем создания периодических массивов антиточек (отверстий) в двумерном ТИ.

Мы показали, что зонная структура одномерного ГК описывается спектром массивных дираковских фермионов, а величина массы, определяющая ширину запрещенной зоны кристалла, определяется магнитным потоком [1]. Если в системе имеется дефект, например граница между областью колец большого радиуса и колец малого радиуса, то в середине запрещенной зоны возникают топологически защищенные локализованные состояния [2], подобные известным состояниям Волкова-Панкратова.

Также исследовался двумерный ГК. В отсутствие магнитного поля и спинового рассеяния ($b=0$) спектр энергии содержит дираковские точки. Учет процессов с переворотом спина ($b\neq 0$) приводит к расщеплению каждой дираковской точки на две и появлению целой линии (окружности) дираковских конусов вблизи них. Было учтено магнитное поле, когда в соседних ячейках поле противоположно. Показано, что магнитное поле вызывает расхождение пар энергетических зон. При $b=0$ магнитное поле само по себе индуцирует появление окружности дираковских конусов, размер которой управляется величиной магнитного поля. При $b\neq 0$ в этой окружности появляется щель, которая при полуцелом значении магнитного потока содержит 4 изолированные дираковские точки.

Детально изучен ГК вблизи края ТИ, где кольца ГКС сильно связаны с линейным краевым состоянием самого изолятора. Комбинация магнитного поля и спинового рассеяния приводит к открытию щели в спектре. Это указывает на нарушение топологической защиты и возможность создания управляемых локализованных состояний на дефектах.

Таким образом, продемонстрирована возможность создания управляемых геликоидальных кристаллов (как 2D, так и 1D) – метаматериалов с гибко настраиваемой зонной структурой. Параметры системы (размер щели, наличие и тип дираковских точек) эффективно управляются внешним магнитным полем, электрическими затворами и геометрией образца. Это позволяет контролировать возникновение локализованных состояний, что является фундаментальной основой для потенциального применения в квантовых вычислениях (по аналогии с майорановскими состояниями) и устройствах квантовой информатики.

Работа Ниязова Р.А. поддержана именной научной стипендией Губернатора Ленинградской области.

1. Niyazov R.A., Aristov D.N., Kachorovskii V.Yu. // Phys. Rev. B. 2023. V. 108. P. 075424
2. Niyazov R.A., Aristov D.N., Kachorovskii V.Yu. // JETP Letters. 2023. V. 118. P. 376-383

**Релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока
для состояний с одной, двумя и тремя дырками в замкнутой электронной оболочке**

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

E-mail: oleynichenko_av@pnpi.nrcki.ru

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

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

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

Высокоточное релятивистское моделирование электронных состояний атомов и молекул, которые можно представить дырками в замкнутой электронной оболочке, необходимо для количественных исследований процессов ионизации, интерпретации фотоэлектронных, рентгеновских и оже-спектров, изучения процессов межатомного кулоновского распада, а также как инструмент исследования экзотических и короткоживущих систем, представляющих интерес для фундаментальной физики.

Впервые разработана, реализована в виде высокоэффективной программы и включена в комплекс [1] релятивистская версия метода связанных кластеров в пространстве Фока с полным неитеративным учётом вкладов трёхкратных возбуждений (модель FS-CCSDT) для систем с одной (сектор пространства Фока $1h0p$), двумя ($2h0p$) и тремя ($3h0p$) дырками в замкнутой электронной оболочке [2].

Точность разработанных методов была продемонстрирована как на атомных (атомы и ионы $\text{Ar}^{1/2/3+}$ и $\text{I}^{0/1/2+}$), так и на молекулярных (Ar_2^+ , HI^+ , HI^{2+}) системах, для которых доступны достаточно полные и надёжные экспериментальные данные. Типичные погрешности методов FS-CCSD и FS-CCSDT для возбуждённых состояний в низших секторах $1h0p$ и $2h0p$ оценены в 0.05–0.10 и 0.005–0.02 эВ, соответственно. Для модели FS-CCSD этот уровень точности приблизительно соответствует таковому для методов IP-EOM-CCSD, DIP-EOM-CCSD и алгебраического диаграммного построения третьего порядка ADC(3). Модель FS-CCSDT характеризуется примерно в 3–5 раз большей точностью и наравне с недавно реализованным методом DIP-EOM-CCSDT [3] позволяет выполнять наиболее точные на сегодняшний день расчёты электронных состояний одно- и двукратно ионизированных атомов и небольших молекул. В секторе $3h0p$ (три дырки в замкнутой оболочке) модели FS-CCSD и FS-CCSDT позволяют достигать средней погрешностей порядка 0.13 и 0.06 эВ, соответственно, что позволяет считать их перспективными для моделирования электронных состояний и свойств атомных ионов с весьма сложной электронной структурой; при этом приближение FS-CCSD хорошо подходит для получения предварительных результатов, а FS-CCSDT — для их последующего уточнения. Вместе с тем, сектор $3h0p$ оказывается довольно «экзотическим» для малых молекул ввиду термодинамической нестабильности подавляющего большинства трёхкратно заряженных малых молекулярных ионов.

Рассматриваются также существующие проблемы метода, ограничивающие его область применимости — отсутствие стабильных «референсных» состояний с замкнутой оболочкой (в первую очередь дианионов) для большинства практически важных задач, а также невозможность количественного описания сателлитных электронных состояний из секторов $2h1p$ и $3h1p$.

1. Oleynichenko A.V., Zaitsevskii A., Eliav E. Towards high performance relativistic electronic structure modelling: the EXP-T program package. // Commun. Comp. Inf. Sci. 2020. V. 1331. P. 375–386.
2. Oleynichenko A.V., Zaitsevskii A. Relativistic Fock-space multireference coupled cluster theory with full iterative triples for the one-, two- and three-hole sectors. // J. Chem. Phys. 2001. (submitted).
3. Li R.R., Yuwono S.H., Liebenthal M.D., Zhang T., Li X., DePrince III A.E. Relativistic two-component double ionization potential equation-of-motion coupled cluster with the Dirac–Coulomb–Breit Hamiltonian. // J. Chem. Phys. 2025. V. 163. P. 104112.

QED calculation of g-factor for B-like Th-229 ion in 2p_{3/2} excited state**V.K. Orlov, D.A. Glazov**E-mail: vladimir.orlov@metalab.ifmo.ru
ITMO University, Saint-Petersburg, Russia

High-precision theoretical calculations of the g-factor of highly charged ions are of great importance today. Consideration of the experimental results provides the most rigorous test of bound state QED [1,2] and has already led to the most accurate measurement of the electron mass [3]. ²²⁹Th ion is a promising object for future research including nuclear effects due to the unique nuclear transition in its isomeric state with an exceptionally low energy about 8.3 eV [4]. This property makes ²²⁹Th ion a good candidate for the development of nuclear clocks [5] and the search of new physics, such as variations of fundamental constants [5-6] and dark matter [7].

While highly charged ions are advantageous for their simple structure and enhanced relativistic effects, it's quite a challenge to obtain, e.g., H-like thorium experimentally. To align with experimental studies, states with as many electrons as possible should be considered, despite the increasing complexity of the calculations. Electronic g-factors for H-like, Li-like and 2p_{1/2} B-like thorium have been calculated previously [8], as well as the hyperfine splitting and nuclear magnetic shielding. Moreover, a procedure of determination of the nuclear transition lifetime using g-factor calculations and measurements was proposed in [8]. From an experimental point of view, it is also important to describe the 2p_{3/2} excited state of B-like ion, since it can be measured in a single setup [9]. This allows for a more accurate interpretation of the experimentally obtained results.

This work investigates the 2p_{3/2} state of boron-like thorium-229 ion. The total value of the electronic g-factor is presented, which includes the finite nuclear size effect, screened one-loop and two-loop QED, first and second orders of the interelectronic interaction and the nuclear recoil effect. Obtained results may be applied for determination and control of the nuclear transition lifetime and other experimental purposes.

1. Sturm S. et al. g-factor measurement of hydrogenlike 28 Si 13+ as a challenge to QED calculations // *Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics*. – 2013. – T. 87. – №. 3. – C. 030501.
2. Shabaev V. M. et al. Theory of bound-electron g factor in highly charged ions // *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. – 2015. – T. 44. – №. 3.
3. Sturm S. et al. High-precision measurement of the atomic mass of the electron // *Nature* 2014, 506, 467.
4. Kraemer S. et al. Observation of the radiative decay of the ²²⁹Th nuclear clock isomer // *Nature*. – 2023. – T. 617. – №. 7962. – C. 706-710.
5. Von Der Wense L. et al. Direct detection of the ²²⁹Th nuclear clock transition // *Nature*. – 2016. – T. 533. – №. 7601. – C. 47-51.
6. Dzuba V. A., Flambaum V. V. Using the Th iii ion for a nuclear clock and searches for new physics // *Physical Review A*. – 2025. – T. 111. – №. 5. – C. 053109.
7. Fuchs E. et al. Searching for Dark Matter with the Th 229 Nuclear Lineshape from Laser Spectroscopy // *Physical Review X*. – 2025. – T. 15. – №. 2. – C. 021055.
8. Shabaev V. M. et al. Ground-state g factor of highly charged Th 229 ions: An Access to the M1 Transition Probability Between the Isomeric and Ground Nuclear States // *Physical Review Letters*. – 2022. – T. 128. – №. 4. – C. 043001.
9. Egl A. et al. Application of the continuous Stern-Gerlach effect for laser spectroscopy of the Ar 13+ 40 fine structure in a Penning trap // *Physical Review Letters*. – 2019. – T. 123. – №. 12. – C. 123001.

Космологические возмущения в метрике Фридмана для симметричного телепараллельного эквивалента общей теории относительности

А.Н. Семенова^{1,2}, В.П. Вандеев¹, Пархоменко В.А. ²

E-mail: parhomenko2.va@gmail.com

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

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

В данном исследовании мы проводим анализ космологических возмущений в рамках модифицированного симметричного телепараллельного эквивалента общей теории относительности (модифицированный STEGR) [1]. В данной работе мы рассматриваем метрику Фридмана общего вида с независимыми временной и пространственной масштабными факторами. Мы рассмотрели возмущения компонент метрики Фридмана, разложив их на скалярные, векторные и тензорные типы, и для каждого типа вывели линеаризованные уравнения движения в случае для возмущенной идеальной жидкости.

Ключевым результатом работы является полная система уравнений для космологических возмущений в модифицированном STEGR. Мы показываем, что в тензорном секторе теория предсказывает распространение гравитационных волн, аналогичное ОТО, но с параметрической модификацией. Наиболее сложная структура наблюдается в скалярном секторе, где уравнения демонстрируют, как дополнительные параметры теории влияют на эволюцию возмущений. Важным этапом работы стала проверка на соответствие общей теории относительности.

Полученные результаты являются основой для дальнейшего применения, модифицированного STEGR в астрофизических и космологических приложениях, где могут проявляться отклонения от стандартной теории, такие как явления «темной материи» и «темной энергии».

1. Golovnev A., Klimova S., Semenova A. N., Vandeev V. P. Weak Gravity Limit in Newer General Relativity // Universe. – 2025. – Vol. 11. – № 5. – P. 149. – DOI: <https://doi.org/10.3390/universe11050149>.

Конкурирующие каналы релаксации в неадиабатической динамике электронно-возбужденного катиона метанимина

Д.С. Попов, А.В. Боченкова

E-mail: greendmitrymos@yandex.ru

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

Катион метанимина (CH_2NH_2^+), играющий важную роль в $\text{N}_2\text{-CH}_4$ атмосфере Титана [1], представляет также и значительный фундаментальный интерес. Будучи простейшим протонированным основанием Шиффа, он служит модельным соединением для исследования неадиабатической динамики хромофора зрительных фоторецепторных белков [2]. Фотоиндуцированная диссоциация катиона с разрывом по CN связи и фотоизомеризация являются основными путями электронной релаксации катиона. В данной работе выявлен новый канал внутренней конверсии, связанный с образованием H_2 и HCNH^+ – преобладающего иона в верхней атмосфере Титана. Цель данного исследования – изучить механизмы релаксации электронно-возбужденного катиона метанимина с помощью многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений.

С помощью метода XMCQDPT2/SA(3)-CASSCF(12,12)/aug-cc-pVDZ рассчитаны энергии вертикальных переходов и найдены конические пересечения между первыми тремя синглетными состояниями катиона метанимина. Показано, что состояние S_2 отвечает возбуждению в π -подсистеме, и переход в это состояние характеризуется большой силой осциллятора. При этом S_1 соответствует возбужденному $\sigma\pi^*$ -состоянию, и соответствующий переход $S_0 \rightarrow S_1$ оказывается запрещенным по симметрии в равновесной геометрии молекулы в основном электронном состоянии. Однако этот переход разрешен по вибронному механизму. Из анализа сечений поверхностей потенциальной энергии и топографии вблизи трех найденных конических пересечений можно сделать вывод о существовании нескольких путей релаксации, которые возникают за счет бифуркации после прохождения системой первого конического пересечения S_2/S_1 при начальном возбуждении в состояние S_2 . Основной путь внутренней конверсии из промежуточного состояния S_1 связан с коническим пересечением S_1/S_0 , в котором характер возбужденного состояния становится $\pi\pi^*$. Данное коническое пересечение связано с внутримолекулярным вращением в катионе по связи CN. Прохождение данного пересечения может также приводить к разрыву CN связи, так как увеличение длины этой связи не снимает вырождение двух состояний. Второй путь релаксации, не описанный в литературе, также проходит через два конических пересечения, S_2/S_1 и S_1/S_0 ; однако возбужденное состояние здесь имеет характер $\sigma\pi^*$. Данный канал приводит либо к образованию исходного катиона в колебательно-возбужденном состоянии S_0 , либо к фотоиндуцированной фрагментации с одновременным отрывом двух атомов водорода от атома углерода и образованием промежуточного высокорекреационного карбена CNH_2^+ , который безбарьерно изомеризуется в HCNH^+ . В работе также обсуждается константа ветвления двух каналов и влияние бифуркации в возбужденном состоянии S_1 на фотоиндуцированную динамику катиона метанимина.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-43-00041. Расчеты проведены с использованием оборудования коллективного пользования вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также локальных ресурсов (RSC Tornado), предоставленных в рамках Программы развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

1. Quantum chemical spectral characterization of CH_2NH_2^+ for remote sensing of Titan's atmosphere / R. Thackston, R. C. Fortenberry // *Icarus*. – 2018. – Vol. 299. – P. 187–193.
2. Conical intersection dynamics of the primary photoisomerization event in vision / D. Polli, P. Altoè, O. Weingart [et al.] // *Nature*. – 2010. – Vol. 467. – P. 440–443.

Релятивистский метода связанных кластеров сокращённого ранга с учётом двукратных возбуждений

А. С. Румянцев^{1,2}, А. В. Олейниченко^{1,3}, А. В. Зайцевский^{1,4}

E-mail: attoatom@gmail.com

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

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

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

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

Теоретическое моделирование электронной структуры материалов с f-элементами (лантаноидами и актиноидами) требует одновременного учёта релятивистских и корреляционных эффектов с высокой точностью. Наиболее подходящими для этой задачи являются методы, основанные на теории волновой функции, в частности, релятивистский метод связанных кластеров (relativistic coupled cluster, RCC), однако их приложение к изучению подобных соединений сопряжено с значительными вычислительными затратами. Существенно снизить вычислительную сложность позволяет использование тензорных разложений для представления молекулярных интегралов и кластерных амплитуд, а также для оптимизации алгоритмов, реализующих рабочие уравнения метода.

Были сформулированы уравнения релятивистского метода связанных кластеров в приближении одно- и двукратных возбуждений (CCSD) в терминах диаграмм Голдстоуна. Тензорное разложение Таккера позволяет представить тензор двукратных кластерных амплитуд, как и в нерелятивистском случае [1], в виде:

$$t_{ai}^{bj} = \sum_{XY} U_{ai}^X U_{bj}^Y T^{XY}, \quad (1)$$

где U_{ai}^X -- проектор на подпространство сжатых амплитуд, T^{XY} -- тензор сжатых амплитуд. При этом стоит отметить, что эффективный ранг (размер по каждому измерению) тензора T^{XY} должен приблизительно линейно зависеть от размера системы [2]. Также для снижения вычислительной сложности необходимо использовать представление молекулярных двухэлектронных интегралов в виде разложения:

$$(pr | qs) = \sum_Q \boxed{} B_{pr}^Q B_{qs}^Q. \quad (2)$$

С помощью проекторов, полученных более простыми методами теории многочастичных систем, уравнения метода связанных кластеров были переформулированы в терминах тензора сжатых амплитуд и разложения двухэлектронных интегралов. Таким образом, использование этих подходов позволяет снизить вычислительную сложность релятивистского метода CCSD с $O(N^6)$ до $O(N^5)$, где N — количество молекулярных спиноров. Выполнена программная реализация уравнений метода RR-RCCD, с помощью которой были проведены пилотные расчёты различных соединений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 24-73-00076, <https://rscf.ru/project/24-73-00076/>).

1. Lesiuk M. Quintic-scaling rank-reduced coupled cluster theory with single and double excitations. // J. Chem. Phys. 2022. 156, 064103.
2. Oleynichenko A. V. et al. On the rank-reduced relativistic coupled cluster method. // J. Chem. Phys., 2025 163, 044113.

К.А. Руссков¹, А.В. Головнёв²

E-mail: kerill.russ42alex@gmail.com

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия²The British University in Egypt, El Sherouk City, Egypt

Данная работа является обзором идеи ослабления связей (relaxation of constraints) в калибровочных теориях, к которой в последние годы возрос интерес в области квантовой космологии, как к возможному решению так называемой “проблемы времени” [1-5]. Оказывается, что данные идеи не новы. Они появлялись ещё в работах Фока, Дирака и Штюкельберга [6].

Мы рассматриваем класс теорий, в которых “калибровка бьёт дважды”, приводя к исчезновению сразу двух динамических мод на каждый калибровочный параметр в законе преобразований. Мы показываем, что для них ослабление связей является артефактом наложения недопустимого калибровочного условия в действие теории [7].

Анализ проводится с использованием лагранжевого и гамильтонового формализмов. В качестве гамильтонового формализма используется подход Дирака [8-10]. Доказано, что ослабление связей может быть эквивалентно реализовано тремя способами: (1) добавлением калибровочных условий второго рода по отношению к первичным связям в действие первого порядка с множителями Лагранжа; (2) наложением таких условий в действие до его вариации в лагранжевом формализме; (3) фиксацией множителей Лагранжа при вторичных связях в “некорректной” интерпретации подхода обобщённого гамильтониана (данная интерпретация есть модификация исходной теории, при которой связанные моды становятся калибровочными [11, 12]). На ослабление связей можно смотреть как на модификацию теории, которая приводит к появлению новых динамических степеней свободы в теории. В электродинамике и ОТО эти степени свободы можно рассматривать как некоторое эффективное распределение источников.

1. Burns A.K., Kaplan D. E., Melia T., Rajendran S. Time Evolution in Quantum Cosmology. // arXiv:2204.03043
2. Kaplan D.E., Melia T., and Rajendran S. The Classical Equations of Motion of Quantized Gauge Theories, Part I: General Relativity. // arXiv:2305.01798. 2023.
3. Kaplan D.E., Melia T., and Rajendran S. The Classical Equations of Motion of Quantized Gauge Theories, Part 2: Electromagnetism. // arXiv:2307.09475. 2023.
4. Del Grosso L., Kaplan D.E., Melia T., Poulin V., Rajendran S., and Smith. T.L. Cosmological Consequences of Unconstrained Gravity and Electromagnetism. // arXiv:2405.06374. 2024.
5. Vasak D. Setting free the cosmic time in Quantum Universe. // arXiv:2505.01358
6. Casadio R., Chataignier L., Kamenshchik A. Yu., Pedro F.G., Tronconi A., Venturi G. Relaxation of first-class constraints and the quantization of gauge theories: from “matter without matter” to the reappearance of time in quantum gravity. // Annals of Physics 470 (2024) 169783; arXiv:2402.12437
7. Golovnev A., Russkov K. Revisiting the relaxation of constraints in gauge theories. // arXiv:2505.02468v2. 2025
8. Dirac P.A.M., Generalized Hamiltonian Dynamics. // Canadian Journal of Mathematics, 2:129, 1950.
9. Dirac P.A.M., Generalized Hamiltonian Dynamics. // Proceedings of the Royal Society A, 246:326, 1958.
10. Dirac. P.A.M., Lectures on Quantum Mechanics. // Dover Publications, Inc., New York, 2001. Originally published: Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, 1964.
11. Golovnev A., On the role of constraints and degrees of freedom in the Hamiltonian formalism. // Universe 9. 101, 2023.
12. Golovnev A., On the degrees of freedom count on singular phase space submanifolds. // International Journal of Theoretical Physics. V. 63. No. 212. 2024.

Поправка на собственную энергию к g -фактору водородоподобных ионов: приближение для двух-потенциального вклада**Д.В. Сычков, А.Н. Кочнев, А.В. Малышев.**

E-mail: st106890@student.spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В последние годы достигнут значительный прогресс в экспериментальном определении g -фактора связанного электрона в многозарядных ионах [1-4], что требует соответствующего развития высокоточных теоретических методов для интерпретации получаемых данных. Например, совместные теоретические и экспериментальные исследования позволили выполнить наиболее точное на сегодняшний день измерение массы электрона [5,6].

В настоящей работе рассматривается вершинная диаграмма, описывающая поправку на собственную энергию к g -фактору связанного электрона в многозарядных ионах. Эта диаграмма обладает ультрафиолетовой расходимостью, поэтому для её анализа используется разложение по числу взаимодействий с кулоновским полем ядра. Отдельные члены этого разложения исследуются в координатном и импульсном представлениях [7].

Основная сложность расчета поправок на собственной энергии определяется медленной сходимостью парциальных разложений для вкладов, вычисляемых в координатном пространстве. В работе предложены методы, направленные на ускорение этой сходимости. Главная идея разрабатываемого метода заключается в выделении двух-потенциального вклада, ответственного за медленную сходимость, и получении для него некоторого приближения, которое может быть вычислено в замкнутом виде в импульсном представлении. При этом оставшаяся, неучтенная часть демонстрирует существенно более хорошее поведение. Схожий метод впервые был применен для вклада диаграммы собственной энергии в лэмбовский сдвиг [8]. Подобные методы также с успехом применялись к расчету вкладов двухэлектронных [9] и двухпетлевых [10,11] диаграмм собственной энергии. В работе представлен общий аналитический вывод импульсных и угловых интегралов, что позволяет вычислять поправку на собственную энергию к g -фактору водородоподобных ионов в произвольных состояниях.

1. S. Sturm, A. Wagner, B. Schabinger, J. Zatorski, Z. Harman, W. Quint, G. Werth, C. H. Keitel, and K. Blaum, Phys. Rev. Lett. 107, 023002 (2011).
2. S. Sturm, A. Wagner, M. Kretzschmar, W. Quint, G. Werth, and K. Blaum, Phys. Rev. A 87, 030501(R) (2013).
3. F. Heiße et al., Phys. Rev. Lett. 131, 253002 (2023).
4. J. Morgner et al., Nature 622 (2023).
5. S. Sturm, F. Köhler, J. Zatorski, A. Wagner, Z. Harman, G. Werth, W. Quint, C. H. Keitel, and K. Blaum, Nature 506, 467 (2014).
6. P. J. Mohr, D. B. Newell, B. N. Taylor, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. 97, 025002 (2025).
7. V.A. Yerokhin, P. Indelicato, and V. M. Shabaev, Phys. Rev. A 69, 052503 (2004).
8. J. Sapirstein and K. T. Cheng, Phys. Rev. A 108, 042804 (2023).
9. A. V. Malyshev; E. A. Prokhorchuk; V. M. Shabaev, Phys. Rev. A 109, 062802 (2024).
10. V.A. Yerokhin, Z. Harman, C. H. Keitel, Phys. Rev. A 133 251803 (2024).
11. V. A. Yerokhin, Z. Harman, C. H. Keitel, Phys. Rev. A 111, 042820 (2025).

Квантовые кинетические уравнения и вакуумное рождение пар в сильных внешних полях

А.Г. Ткачев, И.А. Александров

E-mail: tagph@mail.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В докладе рассматриваются квантовые кинетические уравнения (ККУ) для описания механизма Заутера-Швингера, который заключается в рождении электрон-позитронных пар из вакуума в сильном электромагнитном поле. Данный эффект является одним из фундаментальных предсказаний квантовой электродинамики (КЭД), но пока еще не наблюдался экспериментально [1].

Метод ККУ широко применяется для описания процесса рождения пар в однородных электрических полях, произвольным образом зависящих от времени (см., например, [2]). В данном исследовании рассматривается комбинация переменного электрического и постоянного магнитного полей, что обобщает известную в литературе систему ККУ и позволяет проанализировать роль магнитного поля в процессе рождения пар.

Как известно [3], в нулевом порядке по радиационному взаимодействию вероятности рождения пар и спектры частиц могут быть получены, если известны точные одночастичные решения волнового уравнения в соответствующем внешнем поле. Для простоты рассматривается «скалярная КЭД». Основная идея ККУ - построение адиабатического базиса и решение системы уравнений на коэффициенты разложения волновой функции по этому базису. В однородном электрическом поле функции адиабатического базиса с точностью до калибровочного преобразования совпадают с решениями для свободной частицы, поэтому можно получить систему ККУ в замкнутом виде даже в том случае, когда поле имеет произвольную поляризацию [4].

Для учета магнитного поля необходимо использовать релятивистские волновые функции, отвечающие уровням Ландау. В работе в этих функциях была включена параметрическая зависимость от времени через внешнее электрическое поле, и полученный базис был использован для вывода новой системы ККУ. Когда электрическое и магнитное поля параллельны друг другу, система разбивается на счетное множество двухуровневых подсистем, где номер уровня Ландау выполняет роль одного из поперечных импульсов в системе ККУ без магнитного поля. Если же поля не являются параллельными, то система становится существенно сложнее. Подсистемы становятся связанными с соседними. В нашем исследовании были проведены численные расчеты в рамках развитого обобщения метода ККУ и проанализирована роль магнитного поля в процессе рождения пар из вакуума.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда № 23-72-01068.

1. Fedotov, A., Ilderton, A., Karbstein, F., King, B., Seipt, D., Taya, H., Torgrimsson, G. Advances in QED with intense background fields // Phys. Rep. 2023. V. 1010. P. 1.
2. Schmidt, S., Blaschke, D., Röpke, G., Smolyansky, S.A., Prozorkevich, A.V. A quantum kinetic equation for particle production in the Schwinger mechanism // Int. J. Mod. Phys. E. 1998. V. 07. P. 709.
3. Fradkin, E.S., Gitman, D.M., Shvartsman, S.M. Quantum Electrodynamics with Unstable Vacuum. Springer-Verlag, Berlin, 1991. – 288 p.
4. Aleksandrov, I.A., Kudlis, A., Klochai, A.I. Kinetic theory of vacuum pair production in uniform electric fields revisited // Phys. Rev. Res. 2024. V. 6. No. 4. P. 043009.

Релятивистские расчеты электронной структуры и свойств кристаллов галогенидов иттербия

П.А. Хадеева, В.М. Шахова, Ю.В. Ломачук, Н.С. Мосягин, А.В. Титов

E-mail: khadieieva_p@pnpi.nrcki.ru

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

Разнообразие возможностей практического применения материалов с тяжелыми d- и f-элементами в составе обуславливает важность развития теоретических методов для их корректного описания и понимания на атомарном уровне свойств материалов и протекающих в них процессов. Однако, теоретическое моделирование электронной структуры данных соединений является одной из наиболее сложных разделов современной вычислительной квантовой физики и квантовой химии. Основные сложности возникают из-за необходимости одновременного учета релятивистских и корреляционных эффектов с очень высокой точностью, поскольку электронная структура таких материалов имеет ярко выраженный мультikonфигурационный характер и высокую плотность низколежащих состояний.

Для многих практических приложений достаточно смоделировать электронную структуру некоторого относительно небольшого фрагмента кристалла, рассматривая остальную часть системы как «замороженное окружение», поэтому в данной работе расчет периодической структуры сводится к рассмотрению кристаллического фрагмента с подстраиваемым-под-соединение потенциалом внедрения (compound-tunable embedding potential, СТЕР [1-3]). В рамках данного подхода моделирование фрагмента кристалла может быть выполнено с использованием методов теории волновой функции, например, методами связанных кластеров (СС, coupled clusters).

Для проверки качества воспроизведения электронной плотности вблизи тяжелого атома необходимо разработать некоторый универсальный инструмент. В случае рассмотрения кристаллических соединений для этой цели удобно выбрать химический сдвиг (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС). Прямые методы вычисления ХС линий РЭС практически не применимы для исследования соединений с тяжелыми элементами, поэтому в отделе квантовой физики и химии НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ был разработан новый двухшаговый метод расчета ХС линий РЭС [4].

С помощью данного подхода проведено исследование кристаллов дибромидов и диодидов иттербия. Проведен анализ структурных параметров кристаллов YbBr_2 и YbI_2 в рамках расчетов с периодическими граничными условиями методом теории функционала плотности РВЕ0. Для выбранных систем построены фрагменты кристаллов с подстраиваемым-под-соединение потенциалом внедрения и вычислены ХС линий РЭС атома иттербия для проверки качества воспроизведения электронной плотности вблизи тяжелого атома.

Работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 24-73-00076.

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

Поправка на собственную энергию к сверхтонкой структуре водородоподобных ионов в кулоновской калибровке**А.С. Шаманаев, А.В. Малышев**

E-mail: work@ashamanaev.ru

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

Квантовоэлектродинамические поправки являются одним из важнейших эффектов, влияющих на тонкую структуру атомных спектров. Чтобы соответствовать точности современных экспериментов, подобные эффекты должны быть рассчитаны с высокой точностью. В первом порядке по постоянной тонкой структуры α ведущий вклад связан с диаграммой собственной энергии. Численный расчёт соответствующей поправки осложнён для малых значений заряда Z ядра сильными численными сокращениями между различными вкладами.

При вычислении диаграмм имеет место некоторый произвол в выборе калибровки для электромагнитного поля, от этого выбора получаемые результаты естественно не зависят. Однако удачный выбор может существенно улучшить точность расчетов. В работах [1-4] соответствующая поправка для водородоподобных ионов была исследована в фейнмановской калибровке. Как известно, в ряде случаев облегчить расчёт для связанных состояний может калибровка Кулона. Так, например, в работах [5-7] были продемонстрированы преимущества применения данной калибровки в расчётах вклада собственной энергии в лэмбовский сдвиг в водородоподобных ионах. Соответствующие перенормированные выражения для оператора собственной энергии свободного электрона и для вершинного оператора в кулоновской калибровке были получены в [8,9].

В данной работе исследуется поправка на собственную энергию к сверхтонкой структуре водородоподобных ионов в кулоновской калибровке. Нужное выражение разделяется на приводимый, неприводимый и вершинный вклады. Произведён расчёт нуль- и одно-потенциальных вкладов для неприводимой части, перенормированных выражений для приводимого и вершинного вкладов. Продемонстрирован способ облегчить расчёт в случае точечного ядра с помощью применения вириальных соотношений [10], согласующийся с чисто численными методами. Работа продолжается в направлении много-потенциального вклада. Главным достижением работы станет проверка существующих расчётов и оценка улучшения точности в случае кулоновской калибровки.

1. V. A. Yerokhin, V. M. Shabaev, One-loop self-energy correction to the 1s and 2s hyperfine splitting in H-like systems, Phys. Rev. A 64, 012506 (2001).
2. V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, G. Plunien, All-order results for the one-loop QED correction to the hyperfine structure in light H-like atoms, Phys. Rev. A 72, 052510 (2005).
3. V. A. Yerokhin, U. D. Jentschura, Electron Self-Energy in the Presence of a Magnetic Field: Hyperfine Splitting and g Factor, Phys. Rev. Letters 100, 163001 (2008).
4. V. A. Yerokhin, U. D. Jentschura, Self-energy correction to the hyperfine splitting and the electron g factor in hydrogenlike ions, Phys. Rev. A 81, 012502 (2010).
5. D. Hedendahl, J. Holmberg, Coulomb-gauge self-energy calculation for high-Z hydrogenic ions, Phys. Rev. A 85, 012514 (2012).
6. J. Holmberg, Scalar vertex operator for bound-state QED in the Coulomb gauge, Phys. Rev. A 84, 062504 (2011).
7. V. A. Yerokhin, Z. Harman, C. H. Keitel, One-loop electron self-energy with accelerated partial-wave expansion in the Coulomb gauge, Phys. Rev. A 111, 012802 (2025).
8. G. S. Adkins, One-loop renormalization of Coulomb-gauge QED, Phys. Rev. D 27, 1814 (1983).
9. G. S. Adkins, One-loop vertex function in Coulomb-gauge QED, Phys. Rev. D 34, 2489 (1986).
10. V. M. Shabaev, Virial relations for the Dirac equation and their applications to calculations of H-like atoms, arxiv:0211087v1 (2002).

Количественная оценка проявления релятивистских эффектов в водородосвязанных комплексах с помощью решения уравнения Дирака-Кулона

Д.А. Шитов, Е.Ю. Тупикина

E-mail: d.shitov@spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Динамическое образование и разрыв водородных связей являются ключевым фактором, определяющим протекание многих биологических процессов. Поэтому точное моделирование водородных связей важно для разработки новых биоматериалов, катализаторов, лекарств и умных полимеров. Однако существующие подходы нередко игнорируют влияние релятивистских эффектов на характеристики водородных связей, что приводит к ошибкам и снижает практическую ценность таких подходов. В частности, при проведении нерелятивистских квантово-механических расчётов могут возникать такие ошибки как завышение орбитальных энергий и менее локализованное распределение заряда остовных электронов, что приводит к отклонениям в существующих корреляциях типа «энергия водородного связывания – электронный параметр», «энергия водородного связывания – спектральный параметр».

По литературным данным [1], четырёхкомпонентное моделирование тензора магнитного экранирования ядер водорода даёт поправку к нерелятивистским данным до 50% от абсолютного значения, улучшая согласие с экспериментом. Тем не менее систематического изучения релятивистских эффектов для водородосвязанных систем не проводилось.

В работе [2] для бифторид-аниона было получено, что изменение компонент тензора магнитного экранирования ядра атома водорода при переходе к нерелятивистскому пределу составляет максимум 0.2 миллионных долей в шкале единиц – десятков миллионных долей. Данный результат демонстрирует необходимость учёта релятивистских эффектов для описания локализованного распределения электронной плотности даже для систем, содержащих лишь лёгкие и среднетяжёлые ядра (первые два-три периода таблицы Менделеева).

На примере водородосвязанных комплексов с различной прочностью водородного связывания (низкой прочностью, средней прочностью и сильной прочностью) с помощью решения уравнения Дирака-Кулона будут оценены электронные (распределение электронной плотности) и спектральные (компоненты тензора магнитного экранирования ядер) параметры. Для ключевых параметров будет найден нерелятивистский предел за счёт масштабирования скорости света, что позволит оценить вклад релятивистских эффектов в искомые параметры. Такой подход позволяет сохранить аналитический вид гамильтониана Дирака-Кулона и одноэлектронных биспиноров, делая оценку релятивистских эффектов максимально точной. Для аппроксимации многоэлектронной волновой функции будут использованы неколлинеарные обменно-корреляционные функционалы KT2, PBE, PBE0 с привлечением базисных наборов семейства Дэйлла. Потенциал со стороны атомных ядер моделируется с помощью изотропного гауссового распределения ядерной плотности.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 24-73-10155.

1. Komorovsky S. et al. Four-Component Relativistic Density Functional Theory Calculations of NMR Shielding Tensors for Paramagnetic Systems // The Journal of Physical chemistry A. 2013. V. 117. No. 51. P. 14209–14219.
2. Kaplanskiy M. V. et al. Deconstructing ^1H NMR Chemical Shifts in Strong Hydrogen Bonds: A Computational Investigation of Solvation, Dynamics, and Nuclear Delocalization Effects // Journal of Chemical Information and Modeling. 2025. V. 65. No. 10. P. 5019–5034.

Концепция логарифмического фрактала и её применение для исследования макрообъектов

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

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

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

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что их невозможно точно измерить привычными нам мерами (длина, площадь, объём). Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. Логарифмические фракталы – особый класс фракталов. Недавние исследования показывают, что часто живые системы развиваются по законам логарифмического фрактала [2, 3], что подчёркивает актуальность изучения этого класса и развития теории логарифмического фрактала.

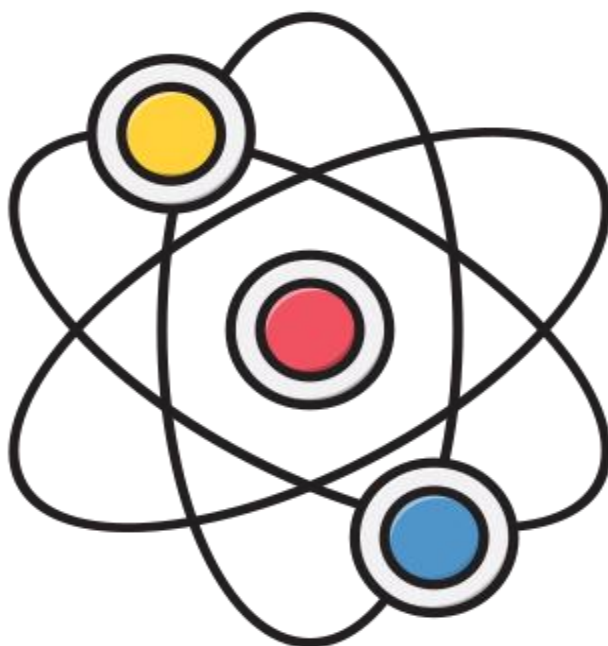
Для изучения фрактальных свойств объектов часто используются эксперименты по малоугловому рассеянию (МУР) нейтронов, рентгеновского (синхротронного) излучения, а также света. Метод МУР не только даёт информацию о фрактальной размерности, но и позволяет классифицировать объекты. В этих измерениях интенсивность рассеяния, в зависимости от переданного импульса, описывается законом Порода в некотором диапазоне масштабов $I(q) = Aq^{(-D)}$, где I – интенсивность рассеянного излучения, q – переданный импульс, D – показатель степени, который связан с фрактальной размерностью D известным образом. Для исследования двумерных объектов был разработан метод численного Фурье-анализа, который позволяет моделировать эксперименты по малоугловому рассеянию. С помощью этого метода объекты двумерного пространства также были разделены на классы [4].

Используя метод численного Фурье-анализа, мы исследовали объекты, относящиеся к классу логарифмических фракталов. Такие объекты обладают иерархической структурой и подчиняются правилу равенства площади при изменении масштаба. Ветвление хвойных и лиственных деревьев хорошо описывается структурой логарифмического масштаба на крупных масштабах. Обнаружение этого факта позволило сформулировать новые принципы роста лиственных деревьев (дубы, берёзы): при ветвлении дерева суммарная площадь поверхности дочерних веток равна площади поверхности родительской ветки [5]. Применение метода численного Фурье-анализа показало, что ветки ели с хвоей так же являются логарифмическими фракталами, что обусловлено необходимостью оптимизации процесса фотосинтеза, в котором участвует хвоя. При этом те же ветки без иголок являются массовыми фракталами в двумерном пространстве, что, видимо, необходимо для оптимизации транспортных функций системы ветки.

Логарифмические фракталы характеризуются новым дополнительным параметром – логарифмической подразмерностью (помимо фрактальной размерности). Мы провели математические вычисления и пришли к выводу, что этот параметр характеризует изменение фрактала при переходе от одной генерации к следующей, это, по-видимому, означает, что логарифмический фрактал следует рассматривать не просто как статический объект, а как процесс, который развивается с течением времени, параметризованном через номер генерации.

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature // New York: Freeman. 1983.
2. Grigoriev S. V. et al. // Phys. Rev. E 105. 044412.
3. Григорьев С.В. и др. // ZhETF, V. 163, № 3, P. 428.
4. П.М. Пустовойт и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 12, 3 (2020).
5. Grigoriev S. V. et al. // Phys. Rev. E 105. 044412.

Физика атомного ядра и частиц



Изучение возможности регистрации выбивания электронами протонов и кластеров из ядер

А. Аламури¹, А.А. Дзюба^{1,2}, А.В. Добровольский², А.Д. Чубыкин²

E-mail: st123089@student.spbu.ru

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

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

Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт» – ПИЯФ обладает значительным научным заделом в области экспериментов с применением технологии активной мишени [1-2]. Данная методика предполагает, что время-проекционная камера (ВПК) выполняет двойную функцию, служа одновременно и газообразной мишенью, и детектором для регистрации вторичных частиц отдачи. В рамках планируемой работы предлагается выполнить серию экспериментов по измерению дифференциальных сечений реакций выбивания протонов и кластерных частиц (дейтронов и ядер гелия) из различных газовых сред (He, CH₄, N₂, Ar). Исследования планируется проводить в широком диапазоне энергий электронного пучка.

Для реализации данной научной программы в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ ведется разработка специализированной время-проекционной камеры. Ее проектные параметры включают: диаметр области активной мишени 100 мм, ширину дрейфового пространства 200 мм и способность работать с давлением газа до 25 бар.

Подготовка к проведению эксперимента потребовала детального моделирования установки с помощью пакета программ GEANT4, исследования влияния электронных шумов, а также шумов, наведенных пучком электронов, на угловое и энергетическое разрешение установки [3], а также создания алгоритма идентификации типа частицы отдачи, основанный на моделировании и использовании статистического критерия χ^2 [4].

Эффективность регистрации во многом определяется процессами, происходящими во время дрейфа электронов ионизации. Такими процессами могут быть: рекомбинация электрон-ионных пар; прилипание, т.е. поглощение электронов примесями; продольная диффузия, ухудшающая временное разрешение установки; поперечная диффузия и конфигурация электрического поля ВПК, ухудшающие пространственные характеристики камеры; проницаемость сетки. В работе представлен расчет этих влияния процессов на характеристики сигналов ВПК.

1. J. P. Burq et al., Nuclear Physics, B 217, 285-335 (1983), "Soft πp and pp Elastic Scattering in the Energy Range 30-GeV to 345-GeV".
2. Г.Д. Алхазов и др., Физика элементарных частиц и атомного ядра, Т. 53, вып. 3, стр. 661-691 (2022), "Исследование структуры экзотических ядер на установке с активной мишенью ИКАР методом упругого рассеяния протонов в инверсной кинематике".
3. А. Аламури, А.А. Дзюба, Изучение возможности регистрации выбивания электронами протонов и кластеров из ядер // Сборник тезисов XI Всероссийского молодежного научного форума с международным участием «Open Science 2024». – Гатчина: НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2024. – 159 с.
4. А. Аламури, А.А. Дзюба, Разработка метода идентификации типа частиц отдачи в ионизационной камере // Труды LXXV Международной конференции «ЯДРО-2025. Физика атомного ядра и элементарных частиц. Ядерно-физические технологии» (направлена для публикации).

Численное моделирование экспериментов по столкновениям тяжелых ионов с применением голографических уравнений состояния

А.В. Ануфриев, В.Н. Коваленко

E-mail: anton.anufriev@spbu.ru

Санкт-Петербургский Государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В начале XXI века было экспериментально зафиксировано новое фазовое состояние силь но взаимодействующей материи- как кварк-глюонная плазма (КГП) [1]. Одно из популярных направлений изучения свойств кварк-глюонной плазмы связано с рассмотрением дуальности теории гравитации в AdS5-пространстве и калибровочной КХД в области деконфайнмента фазовой диаграммы (т.н. голографические подходы), что позволяет единым образом сопоставить термодинамические параметры КГП и соответствующей черной браны в AdS5 в рамках соответствующего уравнения состояния.

В настоящей работе предлагается метод калибровки голографического уравнения состояния, разработанного теоретической группой И. Я. Арефьевой [2], для изучения свойств КГП в рамках релятивистской гидродинамики. Свободные параметры модели фитируются с использованием результатов решеточной КХД для масс кварков, которые приближены к физическим значениям [3]. Для решения проблем регрессии и оптимизации во время калибровки соответствующих параметров применяются методы машинного обучения. Показано влияние учета странности в рамках голографической модели и сшивки соответствующего уравнения состояния с уравнением адронного газа [4] при малых температурах. Для практического применения при изучении столкновений тяжелых ионов настроенное голографическое уравнение со стояния было включено в пакеты релятивистской гидродинамики MUSIC [5] и vHLLE [6].

Для получения окончательных спектров адронов проводится численное моделирование с использованием фреймворков iEBE-MUSIC и SMASH-vHLLE, которые дополнительно включают набор пакетов для начальных условий, эффекта вымораживания, адронизации и адронных перерассеяний. С применением данных фреймворков были рассчитаны адронные спектры по поперечной массе при энергиях эксперимента NA49.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ, шифр проекта 103821868

1. J. Adams et al. (STAR Collab), Experimental and Theoretical Challenges in the Search for the Quark-Gluon Plasma: The STAR Collaboration's Critical Assessment of the Evidence from RHIC Collisions // Nucl. Phys. A 757 102 (2005)
2. I. Aref'eva, K. Rannu, P. Slepov, Holographic anisotropic model for light quarks with confinement-deconfinement phase transition // J. High Energ. Phys. 2021, 90 (2021).
3. M. Cheng et al., QCD equation of state with almost physical quark masses // Phys. Rev. D 77, 014511 (2008)
4. V. Vovchenko, H. Stoecker, *Thermal-FIST: A package for heavy-ion collisions and hadronic equation of state* // Comput. Phys. Commun. 244, 295 (2019)
5. B. Schenke, S. Jeon, C. Gale, (3+1) D hydrodynamic simulation of relativistic heavy-ion collisions // Phys. Rev. C 82, 014903 (2010)
6. Iu. Karpenko, P. Huovinen, M. Bleicher, A 3+1-dimensional viscous hydrodynamic code for relativistic heavy ion collisions // Comput. Phys. Commun. 185 (2014), 3016

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

E-mail: arutiunova_ai@pnpi.nrcki.ru

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

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ имеет огромный опыт в проведении экспериментов с использованием метода активной мишени [1-2]. В этом методе время-проекционная камера (ВПК) является одновременно газовой мишенью и детектором частиц отдачи. Использование такой методики позволяет наблюдать выбивание протонов и дейтронов из ядер гелия и азота (электронный пучок с энергией 720 МэВ). Электроны чувствительны только к электромагнитной структуре атомного ядра, в то время как протоны чувствительны к распределению ядерной материи. Исследование процессов неупругого рассеяния протонов предоставит дополнительную информацию о структуре ядер. Реакции с выбиванием нуклонов и кластеров позволяют получить ценные новые данные об энергетических и угловых распределениях нуклонов, кластеров и их корреляциях. Постановка эксперимента с использованием метода активной мишени существенно улучшит энергетическое разрешение и позволит детектировать протоны и кластеры с энергиями порядка ~ 1 МэВ, что является преимуществом по сравнению с традиционной схемой исследований, использующих твердотельную мишень.

Предлагается провести цикл исследований и определить дифференциальные сечения выбивания протонов и кластеров (дейтронов и ядер гелия) на различных газовых мишенях (He, CH₄, N₂, Ar) при различных энергиях протонного пучка. Одним из возможным вариантов проведения эксперимента является использование выведенных пучков ускорителя протонов СЦ-1000 (НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ) с энергиями от 100 до 1000 МэВ.

Для проведения этого эксперимента может быть использована ВПК АСТАФ2 с диаметром зоны активной мишени 350 мм, дрейфовым промежутком 216 мм, между анодом и сеткой 3 мм, и рабочим давлением до 10 бар.

Для подготовки предложения по проведению эксперимента проводится моделирование установки с помощью пакета программ GEANT4 [3]. Построена компьютерная модель детектора; исследовано влияние на угловое и энергетическое разрешение установки шумов, наведенных пучком протонов различных энергий и интенсивностей. Предложен метод идентификации типа частиц отдачи.

1. J. P. Burq et al., Nuclear Physics, B 217, 285-335 (1983), "Soft πp and pp Elastic Scattering in the Energy Range 30-GeV to 345-GeV"
2. Г.Д. Алхазов и др., Физика элементарных частиц и атомного ядра, Т. 53, вып. 3, стр. 661-691 (2022), "Исследование структуры экзотических ядер на установке с активной мишенью ИКАР методом упругого рассеяния протонов в инверсной кинематике"
3. S. Agostinelli et al, Geant4 – A Simulation Toolkit // Nucl. Inst. Meth. A, 2003, T. 506, C. 250-303.

Влияние учета детальной геометрии активной зоны на поток антинейтрино от реактора ВВЭР-1000**И.Н. Жутиков^{1,2}**

E-mail: Zhutikov_IN@nrcki.ru

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, пл. Академика Курчатова, дом 1, 123098, Россия²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Каширское шоссе, дом 31, 115409, Россия

В последние годы эксперименты с реакторными антинейтрино на АЭС получили широкое распространение: высокий поток от промышленных реакторов делает регистрацию событий на дистанциях 10–20 м обеспечивает высокую статистику нейтринных взаимодействий [1,2]. Однако для корректной интерпретации таких измерений точечная аппроксимация источника недостаточна: поток чувствителен к конечным размерам и внутренней структуре активной зоны (АЗ). Для ВВЭР 1000 геометрические масштабы АЗ сопоставимы с расстояниями до детекторов, и распределение энерговыделения/долей деления формирует анизотропию и систематические поправки к ожидаемым потокам и отношениям энергетических спектров, измеряемым на разных расстояниях от АЗ [3]. В этой работе было рассмотрено влияние детальной трехмерной геометрии АЗ ВВЭР 1000 на поток антинейтрино на малых базах.

В работе было выполнено моделирование 13 й и 14 й кампаний 3 го блока Калининской АЭС: трехмерные расчёты выгорания и распределения мощности в БИПР 7А, эволюция изотопного состава и долей деления в ТВС М, с использованием графика тепловой мощности энергоблока за ~510 эффективных суток данных кампаний. В результате были получены картограммы распределения мощности и долей деления U^{235} , U^{238} , $[Pu]^{239}$, $[Pu]^{241}$. Среднее расхождение между расчётными и измеренными мощностями по данным внутриреакторного контроля составило $\approx 2,8\%$, а погрешность долей деления $\sim 5\%$ (по паспорту программы ТВС-М). Спектр рассчитывался суммированием по всем элементам объёма АЗ; результаты сопоставлялись с упрощенными моделями, пренебрегающими геометрией АЗ, точечной моделью со статическим «геометрическим» центром и «динамическим» центром, изменяющимся вслед за изменением энерговыделения АЗ.

Результаты расчётов показывают, что на базах 10–20 м учёт конечных размеров и неоднородностей даёт поправки порядка нескольких процентов и выраженную направленную зависимость; наибольший эффект — в направлении «вниз» по оси реактора. Несмотря на различия в начальных загрузках двух кампаний, интегральный поток $\bar{\nu}_e$ меняется слабо, а основная систематика связана именно с геометрией и смещением эффективного центра энерговыделения в ходе кампании. Эти эффекты влияют на отношения спектров, используемые в анализе данных нейтринных детекторов с целью поиска стерильных нейтрино, и должны учитываться при планировании и интерпретации короткобазисных измерений.

1. Abramov A., Chepurnov A., Etenko A. et al.; iDREAM Collaboration. iDREAM: industrial Detector of REactor Antineutrinos for Monitoring at Kalinin nuclear power plant // Journal of Instrumentation (JINST). 2022.
2. Alekseev I., Belov V., Brudanin V. et al.; DANSS Collaboration. DANSS: Detector of the reactor AntiNeutrino based on Solid Scintillator // Journal of Instrumentation (JINST). 2016.
3. Zhutikov I., Litvinovich E., Khvatov V. Effect of the Inclusion of the Detailed Geometry of the Reactor Core on the Calculated Antineutrino Flux from a VVER-1000 Reactor // JETP Lett. — 2024. — V. 119, № 3. — P. 158–165.

Новые измерения периода полураспада ^{71}Ge с Si(Li)-детектором

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

E-mail: ivanov_dv@pnpi.nrcki.ru

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

Потенциальные свидетельства в пользу существования осцилляций нейтрино в стерильное состояние, в частности последние данные эксперимента BEST с искусственным источником ^{51}Cr , связаны с феноменом 20% дефицита нейтрино на уровне значимости 5σ [1].

Обнаруженная с радиохимическими Ga-Ge детекторами «галлиевая аномалия» может объясняться некорректным учётом времени жизни радиоизотопа ^{71}Ge , которому фактически обратно пропорциональна скорость счёта нейтрино. Уточнение значения периода полураспада ^{71}Ge при условии, если оно окажется больше принятого ранее, позволило бы снизить статистическую достоверность «галлиевой аномалии» [2].

Ядро ^{71}Ge распадается путем электронного захвата на основное состояние ^{71}Ga , при этом возникает характеристическое рентгеновское излучение, которое регистрируется по основным линиям $K_{\alpha}(\text{Ga})$ и $K_{\beta}(\text{Ga})$.

С помощью спектрометра на основе Si(Li)-детектора нами выполнены измерения источника ^{71}Ge , полученного путем облучения пластинки природного германия в пучке быстрых и тепловых нейтронов. Установлены основные радиоактивные изотопы, возникающие в источнике, измерены и проанализированы временные зависимости интенсивностей $K_{\alpha}(\text{Ga})$ и $K_{\beta}(\text{Ga})$, которые использовались для получения значения периода полураспада $T_{1/2}(^{71}\text{Ge})$. Совместная процедура подгонки обеих компонент $K_{\alpha}(\text{Ga})$ и $K_{\beta}(\text{Ga})$ за 200 часов измерений приводит к значению $T_{1/2}(^{71}\text{Ge}) = 11.473 \pm 0.026$ (стат.) суток.

Значение согласуется в пределах ошибок с полученными нами ранее на другом спектрометре — $T_{1/2}(^{71}\text{Ge}) = 11.4645 \pm 0.0036$ (стат.) суток, а также с результатами других более ранних измерений [3-5]. Объяснение «галлиевой аномалии», основанное на недооценке периода полураспада ^{71}Ge , исключается на очень высоком уровне достоверности.

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

1. Elliott S. R., Gavrin V. N., Haxton W. C. The gallium anomaly // Progress in Particle and Nuclear Physics. 2024. Vol. 134. doi: 10.1016/j.pnnp.2023.104082.
2. Giunti C., Li Y. F., Ternes C. A., Xin Z. Inspection of the detection cross section dependence of the Gallium Anomaly // Physics Letters B. 2023. Vol. 842. doi: 10.1016/j.physletb.2023.137983.
3. Derbin A.V., Drachnev I.S., Ivanov D.V. et al. A New Precision Measurements of ^{71}Ge Lifetime // Physics of Atomic Nuclei. 2025. Vol. 88. P. 52–56. doi: 10.1134/S1063778825700152.
4. Norman E. B. et al. On the Half-Life of ^{71}Ge and the Gallium Anomaly // Physical Review C. 2024. Vol. 109. doi: 10.1103/PhysRevC.109.055501.
5. Collar J. I., Yoon S. G. New Measurements of ^{71}Ge Decay: Impact on the Gallium Anomaly // Physical Review C. 2023. Vol. 108. doi: 10.1103/PhysRevC.108.L021602.

Расчеты кристаллических дефлекторов для вывода протонного пучка из СЦ-1000 НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

П.Ю. Иванова, Д.А. Амерканов, С.А. Артамонов, Б.Л. Горшков, Е.М. Иванов, Ю.М. Иванов, А.В. Илатовский, В.И. Мурзин, В.А. Тонких, Э.В. Фомин

E-mail: ivanova_py@pnpi.nrcki.ru

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

Последние десятилетия активно развивается в физике ускорителей такой инструмент для управления пучками частиц высоких энергий, как изогнутые кристаллы [1]. Благодаря эффекту каналирования заряженных частиц в кристаллах осуществлен вывод пучков в таких крупнейших ускорительных центрах, как Фермилаб, ИФВЭ, ЦЕРН, производится коллимация пучка Большого адронного коллайдера.

С помощью изогнутых кристаллов усовершенствование инфраструктуры одной из базовых установок ПИЯФ – протонного синхроциклотрона СЦ-1000, может расширить экспериментальные возможности комплекса. На синхроциклотроне проводится цикл экспериментов, направленных на исследование возможностей кристаллооптики заряженных частиц в области промежуточных энергий до 1 ГэВ. Полученные из эксперимента [2] характеристики отклоненного миллиметровым кристаллом пучка протонов с энергией 1 ГэВ позволили начать разработку дополнительной системы вывода кристаллическим дефлектором протонного пучка из СЦ-1000 [3, 4].

Многократное кулоновское рассеяние частицы на ядрах и электронах выводит ее из режима каналирования, поэтому с увеличением длины кристалла уменьшается эффективность отклонения. Оптимизация параметров кристалла – одна из ключевых задач подготовительного этапа. На этом шаге используется программа, рассчитывающая траекторию движения частиц в канале методом Монте-Карло [5].

В докладе представлены результаты расчетов кристаллов с большими углами изгиба до 50 мрад.

1. V.M. Biryukov, Y.A. Chesnokov, V.I. Kotov. Crystal channeling and its application at high-energy accelerators. Berlin: Springer Science & Business Media, 2013. 219 p.
2. Эксперимент по высокоэффективному отклонению протонного пучка с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом на синхроциклотроне ПИЯФ / Д. А. Амерканов, Л. А. Вайшнене, Ю. А. Гавриков, Б.Л. Горшков, А.С. Денисов, Е.М. Иванов, П.Ю. Иванова, Ю.М. Иванов, М.А. Кознов, В.И. Мурзин, Л.А. Щипунов // Письма в ЖЭТФ. 2023. № 118. С. 551-556.
3. О выводе протонного пучка из камеры синхроциклотрона ПИЯФ с помощью изогнутого кристалла / Ю.М. Иванов, Д.А. Амерканов, С.А. Артамонов, Е.М. Иванов, П.Ю. Иванова, А.В. Илатовский // LXXV Международная конференция «Ядро-2025. Физика атомного ядра и элементарных частиц. Ядерно-физические технологии». Санкт-Петербург. 2025.
4. Концептуальный проект создания дополнительной системы вывода изогнутым кристаллом протонного пучка из СЦ-1000 НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ / Д.А. Амерканов, С.А. Артамонов, Б.Л. Горшков, Е.М. Иванов, П.Ю. Иванова, Ю.М. Иванов, А.В. Илатовский, В.И. Мурзин, В.А. Тонких, Э.В. Фомин // XXIX Международная конференция по ускорителям заряженных частиц RuPAC'25. Санкт-Петербург. 2025.
5. П.Ю. Иванова. Моделирование эксперимента по высокоэффективному отклонению протонов с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом. СПбГУ: магистр. дисс., 2024.

Систематика и одночастичная структура изомерных состояний в сферических ядрах**А.М. Кострыгина^{1,2}**

E-mail: st087039@student.spbu.ru

¹Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет,
198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, ул. Ульяновская, д. 3²Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики
им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, Россия

В последнее время внимание к ядерным изомерам связано как с фундаментальными вопросами структуры ядра, так и с практическим использованием запасенной в них энергии. В первом случае это уточнение модельных представлений о структуре ядра и изучение возможности изменения времени жизни ядерного изомерного состояния в резонансном окружении [1]. Во втором – изучение возможности искусственного девозбуждения изомерных состояний с высвобождением их энергии [2]. Изомеры также интересны благодаря применению в устройствах хранения энергии, возможных ядерных часах, в астрофизике, лазерах гамма-излучения [3]. Для этих целей необходимо иметь сведения о свойствах изомерных состояний ядер, их распадах и способах получения. Именно этими приложениями определяется актуальность темы выбранного исследования.

В данной работе изучаются свойства изомерных состояний сферических ядер, связанных с орбиталями $1g_{9/2}$ и $1h_{11/2}$. На основе данных ENSDF [4] приведена систематика времен жизни изомерных состояний в A -нечетных ядрах с числом протонов $Z=33\div 49$, в A -нечетных ядрах с числом нейтронов $N=35\div 49$, в нечетно-нечетных сферических ядрах с $A=62\div 130$ и в N -нечетных ядрах с $N=61\div 81$. Одночастичная модель качественно описывает наблюдаемые изменения вероятностей изомерных переходов как по величине на несколько порядков, так и в группах изотопов с ростом массового числа.

Основной вывод проведенной систематики состоит в том, что рассмотренные изомерные состояния имеют одночастичную природу. По-видимому, этой областью исчерпывается существование изомерных состояний в сферических A -нечетных ядрах. У более легких ядер изомерия наблюдается только в нечетно-нечетных ядрах и связана с «высокоспиновыми» состояниями, возникающими при сложении моментов нечетных нуклонов. Для более тяжелых ядер включается деформация, и природа изомерии связана уже не со спином, а с « K -запретом».

1. Логинов Ю.Е., Егоров А.И., Малютенков Э.И. и др. //Письма в ЖЭТФ. 2008. Т.87. С.7.

Логинов Ю.Е. //ЯФ. 2010. Т.73. С.36.

2. Ватулин В.В., Жидков Н.В., Римский-Корсаков А.А. и др. //Изв. РАН. Сер. физ. 2017. Т.81. С.1

Koltsov V. //Plasma Physics and Technology. 2021. V.8. P.5.

3. Мартынова Н.С., Елисеев С.А., Новиков Ю.Н., Филянин П.Е. // Вестник Санкт-Петербургского университета. 2017. Т.4 (62). Вып. 3. С.236.

4. ENSDF: <https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>

Измерение масс нейтронизбыточных нуклидов методом многоотражательной время-пролётной техники

Нечипоренко Ю. В., Гусев Ю. И., Ченмарёв С. В.

E-mail: nechiporenko_yv@npri.nrcki.ru

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

Точное измерение масс нейтрон-избыточных нуклидов необходимо для определения пути звездного нуклеосинтеза в ходе r-процесса, что является важной задачей современной космологии [1]. Также на основе этих данных имеется возможность построения ландшафта масс в нейтрон-избыточной части карты нуклидов, что в свою очередь позволит определить особенности ядерной структуры нейтрон-избыточных нуклидов.

Для решения этих задач был разработан проект ПИТРАП. В ходе реализации первого этапа проекта ПИТРАП предполагается создание установки прецизионной масс-спектрометрии методом многоотражательной времяпролётной техники (MR-TOF) [2]. Метод измерения масс основан на временном разделении двух заряженных частиц, различных по массе, которые проходят одинаковое расстояние, стартуя в одно время с одинаковой кинетической энергией. В России не существует установок MR-TOF, работающих на исследовательских реакторах. Создание подобной установки предлагается на базе уникального реакторного комплекса ПИК, который позволит изучать нуклиды с уникально большим числом нейтронов [3].

1. Burbidge E. M. et al. Synthesis of the elements in stars //Reviews of modern physics. – 1957. – Т. 29. – №. 4. – С. 547.
2. Wollnik H., Przewloka M. Time-of-flight mass spectrometers with multiply reflected ion trajectories //International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes. – 1990. – Т. 96. – №. 3. – С. 267-274.
3. Novikov Y. N. et al. Exotic nuclides at the reactor pik: pitrap project //Exotic Nuclei: Proceedings of the International Symposium on Exotic Nuclei. – 2020. – С. 417-426.

Расчёт изотопических сдвигов для нейтральных атомов**С.Д. Просняк¹, Л.В. Скрипников^{1,2}**

E-mail: prosnyak.sergey@yandex.ru

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

Среднеквадратичный зарядовый радиус - одно из наиболее интересных свойств атомного ядра. Изучая изменение этого параметра в цепочке изотопов элемента, можно сделать выводы о том, как меняется структура ядра с изменением числа нейтронов, а также о том, насколько хорошо ядерная теория описывает зависимость, полученную в эксперименте. В случае короткоживущих изотопов основным экспериментальным методом определения зарядовых радиусов является измерение изотопических сдвигов для энергий переходов в атомных спектрах. Для интерпретации таких экспериментов оказывается необходимым выполнение расчетов электронной структуры с вычислением констант полевого и массового сдвигов. Константа полевого сдвига связана с различным распределением ядерного заряда для рассматриваемых изотопов, а константа массового сдвига связана с эффектом отдачи ядра.

В ходе выполнения исследования нами была разработана методика теоретического расчета констант с детальным анализом, возникающих в результате погрешностей. Было показано, что используемый подход позволяет получить гораздо более высокую точность констант изотопических сдвигов [1, 2, 3]. Разработанный подход был применен при выполнении расчетов для атомов золота [4] и ртути, необходимых для интерпретации будущих экспериментов.

Расчет матричных элементов рассматриваемых свойств был выполнен при поддержке Фонда содействия развитию теоретической физики и математики “БАЗИС”, грант по проекту № 24-1-1-36-1. Расчеты электронной структуры были выполнены при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-12-00092.

1. Filippin L. et al. Multiconfiguration calculations of electronic isotope shift factors in Al I //Physical Review A. – 2016. – Т. 94. – №. 6. – С. 062508.
2. Heylen H. et al. High-resolution laser spectroscopy of Al 27–32 //Physical Review C. – 2021. – Т. 103. – №. 1. – С. 014318.
3. Rosén A., Fricke B., Torbohm G. Volume isotope shifts in low lying transitions of Au I //Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei. – 1984. – Т. 316. – №. 2. – С. 157-160.
4. Cubiss J. G. et al. Deformation versus sphericity in the ground states of the lightest gold isotopes //Physical review letters. – 2023. – Т. 131. – №. 20. – С. 202501.

М.А. Рейтер¹, Д.А. Глазов^{2,3}, А.В. Малышев^{1,3}

E-mail: mikh.reiter@gmail.com

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия²Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия³Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Для корректного описания спектров атомов и атомных систем необходимо учитывать квантово-электродинамические (КЭД) поправки. При рассмотрении связанного состояния электрона ведущие КЭД поправки отвечают диаграммам собственной энергии (СЭ) и поляризации вакуума (ПВ). В системах со сферической симметрией — атомах и ионах — методы для вычисления КЭД поправок хорошо развиты. Однако при рассмотрении более сложных систем — например, молекул, существуют только приближенные методы, опирающиеся на результаты, полученные для отдельных атомов [1,4,5]. Важным примером таких систем являются квазимолекулы (или молекулярные ионы). Квазимолекулы состоят из двух тяжелых ядер и одного или нескольких электронов. Получаемые при столкновениях многозарядных ионов [2], квазимолекулы являются одной из наиболее перспективных платформ для изучения эффектов КЭД в непертурбативном режиме $\alpha Z \sim 1$, где Z это эффективный заряд ядра, и α это постоянная тонкой структуры. Рентгеновское излучение, испускаемое при таких столкновениях, может предоставить уникальную информацию об уровнях энергии молекул и, как следствие, о величине соответствующих КЭД поправок.

В настоящей работе выполнено строгое вычисление поправки к энергии, отвечающей диаграмме СЭ для ряда одноэлектронных квазимолекул. Уравнение Дирака решено численно при помощи аксиально-симметричного обобщения метода дуального кинетического баланса (ДКБ) — метода А-ДКБ [3]. Для построения функции Грина использован метод конечного базисного набора. Диаграмма собственной энергии содержит ультрафиолетовые расходимости, которые устраняются при помощи процедуры перенормировки. При этом необходимо использовать потенциальное разложение, в результате чего диаграмма СЭ распадается на три вклада — ноль-, одно-, и много-потенциальный. Первые два вклада содержат расходимости, устраняемые аналитически. После этого они вычисляются в импульсном представлении. Много-потенциальный вклад вычисляется в координатном представлении с использованием парциального разложения для фотонного пропагатора. Таким образом, производится строгое, непертурбативное вычисление диаграммы СЭ. Полученные результаты находятся в согласии с результатами работ [4,5], в которых КЭД вклады в энергию одно-электронных квазимолекул были посчитаны с использованием парциального разложения двухцентрового потенциала.

1. Shabaev V. M. et al. Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms // *Physical Review A*. 2013. V. 88. No. 1. 012513.
2. Verma P. et al. Spectroscopy of superheavy quasimolecules // *Radiation Physics and Chemistry*. 2006. V. 75. No. 11. P. 2014-2018.
3. Rozenbaum E. B. et al. Dual-kinetic-balance approach to the Dirac equation for axially symmetric systems: Application to static and time-dependent fields // *Physical Review A*. 2014. V. 89. No. 1. 012514.
4. Artemyev A. N., Surzhykov A. Quantum electrodynamical corrections to energy levels of diatomic quasimolecules // *Physical Review Letters*. 2015. V. 114. No. 24. 243004.
5. Artemyev A. N. et al. Ab initio QED calculations in diatomic quasimolecules // *Physical Review A*. 2022. V. 106. No. 1. 012813.

**Применение геометрии лобачевского в исследовании
взаимодействий нуклонов при больших энергиях**

А. А. Балдин, В. С. Темирбулатов

Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна

В настоящее время теория ядерных взаимодействий далека от завершенности. До сих пор, для описания экспериментов в релятивистской ядерной физике применяются приближенные модели и подходы, основанные на более простых примерах ядерных процессов. Наиболее сложной, с точки зрения теоретической интерпретации экспериментальных исследований, является область перехода от описания ядерной материи в протон-нейтронной модели ядра, к области, где существенно влияние внутренних кварк-глюонных степеней свободы нуклонов. В частности, одной из наиболее важных проблем релятивистских взаимодействий, является определение условий, при которых адроны теряют свою индивидуальность и главную роль в ядерных взаимодействиях начинают играть субнуклонные степени свободы. Применение геометрии Лобачевского в пространстве быстрых дает принципиально новый подход описания ядерных процессов в области высоких энергий [1].

В данной работе проводится исследование процессов взаимодействия нейтрона с протоном мишени в водородной пузырьковой камере при энергиях налетающего нейтрона от 1 до 5 ГэВ. В процессе обработки треков в пузырьковой камере определяются значения импульсов и углов разлета вторичных частиц. Применяя законы пространства Лобачевского, вычисляются быстроты продуктов реакции, дефекты образованных треугольников по быстротам и периметры треугольников. Треугольник «снаряд-мишень-вторичная частица» характеризуется дефектом, который прямо пропорционален его площади. При анализе соотношений дефектов к периметрам полученных треугольников, выявляются новые эффекты взаимодействия в релятивистских процессах [2, 3]. Кроме этого, имея энергии и проекции импульсов, вычисляются эффективные массы продуктов реакции. При сопоставлении распределений быстрых в пространстве Лобачевского с эффективными массами определяются массы резонансов, сопутствующих в нейтрон-протонных взаимодействиях. Так в реакции $p \rightarrow p\pi^+\pi^-$ просматривается часть событий, которые происходят с рождением пары Δ -резонансов, где наблюдается характерный пик, соответствующий массам 1,232 ГэВ.

Наибольший интерес данного исследования ожидается в рассмотрении конфигураций в пространстве относительных быстрых. Рассматриваются реакции, когда одна из частиц продуктов реакции приобретает относительно малый импульс на фоне больших импульсов между остальными частицами события. Это так называемые «мягкие процессы» на фоне жестких процессов при взаимодействии нейтрона с протоном. Эта область релятивистской физики ядра пока малоизучена.

1. Балдин А. А. Пространство Лобачевского в релятивистской ядерной физике // Применение и развитие идей Лобачевского в современной физике, Дубна 2004 г. 103-116 с.
2. Черников Н. А. Геометрия Лобачевского и релятивистская механика // Физика элементарных частиц и атомного ядра, Дубна, Том 4, Вып. 3, 1973 г, 773-810 с.
3. Широков П. А. Краткий очерк основ геометрии Лобачевского, М. Наука, 1983 г, 80 с.
4. E. Baldina A. Baldin, Lobachevsky Space in Analysis of Relativistic Nuclear Interactions. New Phenomenon - Directed Nuclear Radiation, Dubna, 8 с.

Физика и техника реакторов и ускорителей



Оптимизация магнитной структуры ондуляторов: метод и экспериментальная верификация

И.А. Ветюгов^{1,2}, М.А. Колюшенков^{1,3}, А.С. Комлев^{1,2}

E-mail: vetiugov.ia21@physics.msu.ru

¹НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Институт новых материалов и нанотехнологий (ИНМН) НИТУ «МИСиС», Москва, Россия.

Ондуляторы являются ключевыми элементами современных источников синхротронного излучения: именно они являются источниками для пользовательских станций. Спектральные характеристики и яркость излучения напрямую связаны с точностью исполнения магнитной структуры ондулятора - малые ошибки поля накапливаются в фазовую ошибку, уширяют пики, повышают фон и ухудшают стабильность энергетического распределения. При проектировании и доводке таких устройств приходится учитывать дискретную природу магнитной сборки, дисперсию остаточных магнитных моментов используемых магнитных блоков и ограничения по времени стендовых работ. Традиционные схемы начальной сортировки и коррекции магнитной структуры ондулятора, подробно описанные в литературе [1–4], дают заметный эффект, но при выраженной дискретности компоновки и реальном разбросе характеристик не дают необходимого результата из-за математических ограничений этих методов. Задачу по подбору комбинаций постоянных магнитов внутри ондуляторной сборки предлагается решить при помощи использования генетического алгоритма [5]. Ранее предпринимались попытки их применения в схожих задачах, однако достигнутая точность не всегда была достаточной для устойчивой практической эксплуатации [6]. В данной работе предлагается усовершенствованный генетический алгоритм, специально разработанный для оптимизации магнитных систем ондуляторов. Этот алгоритм отличается гибкостью при работе с дискретными конфигурациями, что позволяет эффективно перебирать возможные расположения магнитов и минимизировать отклонения поля от синусоидального.

Для проверки работоспособности метода проведена экспериментальная верификация: на стенде из предварительно промеренных постоянных магнитов собран фрагмент периодической структуры в конфигурации, рассчитанной описанным способом; последующие измерения поля показали снижение ошибки по сравнению с расчетными характеристиками и уменьшение фазовой ошибки по сравнению с базовой сортировкой, что согласуется с предсказаниями численного оптимизатора. Полученные результаты подтверждают практическую применимость подхода к юстировке ондуляторных систем в синхротронных комплексах.

1. Scott D. Magnet Block Sorting For Variably Polarising Undulators //Proc. EPAC. – 2004. – С. 461-463.
2. Tanaka T., Kitamura H. Effective initial sorting of undulator magnets //Review of Scientific Instruments. – 2000. – Т. 71. – №. 8. – С. 3010-3015. Семашко Н.Н. и др., Инжекторы быстрых атомов водорода, М.: Энергоиздат, 1981, с. 168.
3. Rakowsky G. et al. A simple model-based magnet sorting algorithm for planar hybrid undulators //Proceedings of IPAC. – 2010. – Т. 10.
4. Tanaka T., Seike T., Kitamura H. Undulator field correction by in-situ sorting //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2001. – Т. 465. – №. 2-3. – С. 600-605.
5. Sohrabi M., Fathollahi-Fard A. M., Gromov V. A. Genetic Engineering Algorithm (GEA): An Efficient Metaheuristic Algorithm for Solving Combinatorial Optimization Problems //arXiv preprint arXiv:2309.16413. – 2023.
6. Chubar O. et al. Application of genetic algorithms to sorting, swapping and shimming of the SOLEIL undulator magnets //AIP Conference Proceedings. – American Institute of Physics, 2007. – Т. 879. – №. 1. – С. 359-362.

Исследование влияния тангенциальной инжекции водородной макрочастицы на эволюцию плазмы в токамаке ТУМАН-3М

Я.А. Рудницкий¹, Абдуллина Г.И.², Аскинази Л.Г.², Белокуров А.А.², Жубр Н.А.², Корнев В.А.², Лебедев С.В.², Разуменко Д.В.², Смирнов А.И.², Тукачинский А.С.²

E-mail: jaroslav.andreich@gmail.com

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

² Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Развитие методов управления параметрами плазмы токамака, в частности, для инициации режимов с улучшенным удержанием, является актуальной задачей физики магнитного удержания плазмы. Одним из таких методов является инжекция топливных и примесных макрочастиц (пеллет). Испарение пеллеты вносит в плазму сильное локальное возмущение концентрации, температуры и источников частиц и тепла. В работе представлены результаты экспериментальных исследований влияния тангенциальной инжекции криогенной водородной пеллеты на эволюцию параметров периферийной плазмы в токамаке ТУМАН-3М.

Основное внимание уделено анализу результатов измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) ленгмюровского зонда, установленного в области последней замкнутой магнитной поверхности. Измерения с временным разрешением 1 мс позволили восстановить динамику плавающего потенциала (V_f), электронной температуры (T_e) и концентрации электронов (n_e) в разрядах с инжекцией пеллеты.

Результаты измерений показали, что в большинстве разрядов после испарения пеллеты наблюдается спад плавающего потенциала V_f , локальное снижение T_e и n_e на периферии на фоне роста среднехордовой плотности плазмы и одновременного спада свечения линии $D\alpha$. Такое поведение согласуется с представлением о формировании транспортного барьера в граничной плазме, что является характерным признаком перехода в режим улучшенного удержания (H-моду), поддерживающийся в течение нескольких мс. Такой сценарий, в отличие от наблюдавшейся ранее самоподдерживающейся H-моды [1], является в настоящее время характерным для пеллет-инжекции в токамаке ТУМАН-3М [2]. Момент обратного перехода (H-L) сопровождается возвратом параметров к исходным значениям. В отдельных случаях, несмотря на признаки L-H перехода по данным иных диагностик, измерения зондом не показали явных изменений, что может быть связано с пространственно-временным усреднением данных зонда.

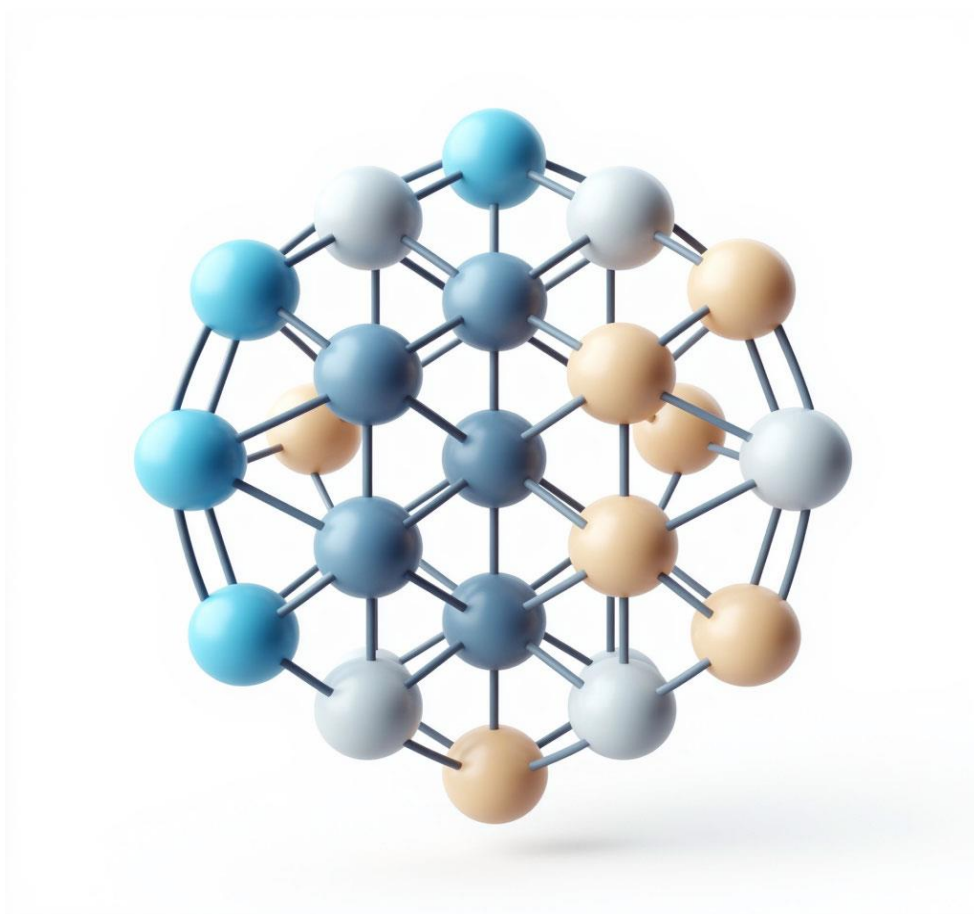
Испарение пеллеты в большинстве случаев приводит к сильному возмущению МГД-колебаний, а некоторых разрядах – к срыву плазмы. Для проверки гипотезы о положении локальных минимумов кривой испарения пеллеты (пространственного и временного распределения излучения) в области рациональных магнитных поверхностей было проведено сравнение кривой испарения с профилем запаса устойчивости плазмы. Обнаружено, что неоднородности профиля излучения в нескольких разрядах локализованы вблизи рациональных магнитных поверхностей (в частности $q=2$), что может указывать на влияние магнитной топологии на процесс испарения пеллеты.

Тангенциальная инжекция пеллеты в токамаке ТУМАН-3М является эффективным инструментом для модификации параметров граничной плазмы и инициирования перехода в режим улучшенного удержания. Полученные результаты важны для планирования дальнейших экспериментов по инжекции пеллеты в токамак ТУМАН-3М, в том числе со стороны сильного магнитного поля.

Работа стандартных диагностик токамака ТУМАН-3М осуществляется при поддержке гос. контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе FFUG-2024-0028. Эксперименты с инжекцией макрочастицы осуществлены при поддержке гос. контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе 0034-2021-0001.

1. Belokurov A.A. et al Nucl. Fusion, 58, 112007 (2018)
2. Белокуров А.А. и др. Письма в ЖТФ, 2024, том 50, вып. 21

Физика конденсированного состояния



Метод малоуглового рассеяния нейтронов и установки МУРН на реакторе ПИК

**Л.А. Азарова^{1,2}, Д.О. Сканченко^{1,2}, К.Ю. Терентьев¹, Е.В. Алтынбаев^{1,2}, Л.А. Аксельрод¹,
С.В. Григорьев¹**

E-mail: azarova_la@pnpi.nrcki.ru

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

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт Петербург, Россия

В Петербургском институте ядерной физики (НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ) продолжают работы по строительству установок на реакторном комплексе ПИК. Приборная база РК ПИК включает комплекс из четырех установок для исследования крупномасштабных структур и динамики, среди которых две установки малоуглового рассеяния: «TENZOR» и «MEMBRANE-2», а также установка спин-эхо малоуглового рассеяния «SESANS» и установка спин-эхо спектроскопии «SEM». Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) является одним из ключевых и наиболее популярных методов, используемых при исследованиях наноструктур и нанообъектов. МУРН это неразрушающий дифракционный метод, при котором рассеяние нейтронов происходит на крупномасштабных неоднородностях (от 1 нанометра до 10 микрометров) и происходит под малыми углами. Этот метод нашел свое применение в широком спектре научных дисциплин: физике, химии, биологии, материаловедении, инженерии и науках о земле. Метод спин-эхо малоуглового рассеяния (SESANS) является комплементарным к методу МУРН и позволяет получать информацию о размерах и форме крупномасштабных неоднородностей, а также их распределении в различных материалах на масштабах от 0.1 до 40 микрометров. Метод спин-эхо спектроскопии (SES), с другой стороны, позволяет исследовать динамику молекул и атомов в материалах, включая информацию о скоростях движения и взаимодействиях между ними. Все три метода являются комплементарными друг другу и в комплексе позволяют получить детальную информацию о структуре, динамике и свойствах материалов, что делает их ценными инструментами в различных областях науки и техники.

Доклад посвящен разработке четырех установок спин-эхо и малоуглового рассеяния нейтронов – «TENZOR», «MEMBRANE-2», «SESANS» и «SEM». Установка «TENZOR» – это классическая высокопоточная монохроматическая малоугловая установка с опцией поляризации, предназначенная для решения задач, связанных с магнетизмом и материаловедением. Установка «MEMBRANA» разработана как времяпролетная машина для исследований в области биологии, физики полимеров, материаловедения и изучения кинетики в образцах. Установка «SESANS» предназначена для изучения крупномасштабных неоднородностей в диапазоне 0.1-40 мкм (углы рассеяния, на которых экстремально малы и их трудно исследовать прямыми методами малоуглового рассеяния) для широкого круга объектов: фрактальные объекты, упаковка хроматина в ядре биологической клетки, магнитные домены, фотонные кристаллы, коллоидные растворы. Установка «SEM» предназначена для исследований динамики надатомных, молекулярных и надмолекулярных структур: синтетические и биологические полимеры, макромолекулы, фуллерены. В докладе будут представлены основные параметры и характеристики упомянутых выше инструментов.

Возможность распространения уединенной волны в дираковском кристалле в рамках модели с двумя дираковскими точками

П.В. Бадикова¹, С.В. Крючков², Е.И. Кухарь¹

E-mail: plnbvdv@yandex.ru

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет», Волгоград, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», Волгоград, Россия

В последнее время в лабораторных условиях получены новые типы двумерных кристаллов [1], которые являются объектом повышенного внимания исследователей в области конденсированного состояния ввиду существенно анизотропной динамики их носителей заряда. А именно, вдоль определённого направления носители движутся подобно дираковским фермионам, а в ортогональном направлении – подобно нерелятивистским частицам с параболической дисперсией. Деформированный графен, в котором натяжение приводит к сближению дираковских точек [2], также может относиться к этому классу материалов. Сближение дираковских точек может сопровождаться топологическим фазовым переходом между состояниями полуметалла и зонного диэлектрика [2].

В настоящей работе рассмотрена модель дираковского гамильтониана, учитывающего сближение дираковских точек и наличие массового слагаемого. Исследован соответствующий электронный спектр. Используемый в работе гамильтониан применяется для описания динамики дираковских электронов в графене со смещёнными дираковскими точками [2], а также в дираковских кристаллах, подверженных высокочастотному излучению [3]. Показана возможность появления зонных долин в законе дисперсии носителей заряда. С использованием полученного энергетического спектра вычислена плотность электрического тока j , возникающего в таком кристалле под действием электрического поля с векторным потенциалом A . С помощью выражения для плотности тока j и уравнений электромагнитного поля записано уравнение для потенциала A . Показано, что наличие энергетических долин в окрестности дираковских точек обеспечивает возможность генерации солитоноподобного электромагнитного импульса. Причем форма этой волны удовлетворяет уравнению осциллятора Дуффинга так, что электромагнитная волна имеет форму 0π -импульса.

Продemonстрировано, что генерация уединенной волны возможна только при определенных соотношениях между массовым слагаемым и расстоянием между дираковскими точками в импульсном пространстве. Преимуществом рассматриваемой структуры является тот факт, что для генерации уединенной волны не требуется наличие конечной (узкой) зоны проводимости, как это предлагалось, например в [4]. Эта волна формируется благодаря области отрицательной эффективной массы, сформированной в окрестности энергетического спектра, расположенной между двумя дираковскими точками.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда на проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований № 25-22-20071

1. Liu C., et al. Highly stretchable graphene nanoribbon springs by programmable nanowire lithography // npj 2D Mater. Appl. 2019. V. 3, № 23.
2. Montambaux G., et al. A universal Hamiltonian for motion and merging of Dirac points in a two-dimensional crystal // Eur. Phys. J. B. 2009. V. 72, № 509. P. 509-520.
3. Kukhar E.I., Kryuchkov S.V. Floquet transitions «Insulator – Semimetal – Insulator» in 2D crystals with displaced Dirac points // Physica E. 2021. V. 134. P. 114811.
4. Tian Q., Wu C. Solitons in superlattices: A tight-binding approach // Phys. Lett. A. 1999. V. 262, № 1. P. 83-85.

Моделирование теплопереноса в паро-гранулированную среду

В.А. Кириш, А.В. Беклемишева, М.Г. Коломытова, В.Н. Беклемишев, П.А. Александров
НИИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

Теоретическое и численное обоснована возможность отвода тепла от второго контура ядерной энергетической установки (ЯЭУ) в лунный реголит. Проанализированы теплофизические свойства реголита и произведено моделирование процессов теплообмена при различных схемах охлаждения.

Ключевые слова: ядерная энергетическая установка (ЯЭУ), полярный реголит, конвективный теплообмен.

Разработана система для отведения излишек тепла от второго контура ядерной энергетической установки способной работать в космических условиях, а также в условиях ограниченного количества воды. Предлагается использовать гранулированную среду в качестве второго контура охлаждения реакторной установки. Известно, что даже при использовании жидкометаллического теплоносителя для охлаждения реактора требуется большой объем воды-пара. В условиях пустынь, космических реакторов вода- очень ценный ресурс. С целью экономии воды предлагается использовать песок (грунт планеты, например, Лунный [1-3]) как приемник тепла. Предполагается два варианта. Первый, предполагается, что в грунте, в данном случае речь идет о реголите – лунном грунте, который в теневой области может охлаждаться до температуры порядка 170 градусов и содержит от пяти до тридцати процентов воды (льда). В таком случае при контакте с трубой теплоносителя она будет испаряться, проходить через слой реголита, повышая способность к теплообмену даже в случае низкой теплопроводности материала. Второй случай, предполагает отсутствие в почве, например, песке в пустыне примесей воды, тогда песок искусственно насыщается водой. В обоих случаях вода экономится, потому как её можно конденсировать, таким образом обеспечивая замкнутый цикл по воде. Предлагаются три метода охлаждения: вращение гранулированной смеси вокруг трубы теплоносителя, флюидизация в воздушном потоке, и система тонких трубок с теплоносителем в потоке пара и частиц.

1. Fa W. Bulk density of the lunar regolith at the Chang'E-3 landing site as estimated from Lunar Penetrating Radar. — *Earth and Space Science*, 2020, vol. 7, № 2.
2. Xiao X., Yu S., Huang J., Zhang H., Zhang Y., Xiao L. Thermophysical properties of the regolith on the lunar far side revealed by the in-situ temperature probing of the Chang'E-4 mission. — *National Science Review*, 2020, vol. 9, № 11.
3. Vasavada A.R., Bandfield J.L., Greenhagen B.T. et al. Lunar equatorial surface temperatures and regolith properties from the Diviner Lunar Radiometer Experiment. — *J. of Geophysical Research Atmospheres*, 2012, vol. 117.

Обработка данных численного эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов

Р.Д. Борисов^{1,2}, Л.А. Азарова^{1,2}

E-mail: st095754@student.spbu.ru

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

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

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) — неразрушающий дифракционный метод, основанный на упругом рассеянии нейтронов на неоднородностях образца (1-1000 нм), превышающих длину волны излучения. Данный метод позволяет проводить анализ структурных характеристик материалов на нанометровом масштабе, включая определение размеров, морфологии и межчастичных взаимодействий в системах нанообъектов, молекулярных ансамблей, кластерных систем и пр. [1].

Актуальность метода стимулирует развитие математического моделирования МУРН экспериментов, являющимся ключевым инструментом по разработке и оптимизации исследовательских установок. Существует два способа проведения МУРН эксперимента: монохроматический и времяпролетный. Использование широкого спектра во времяпролетном МУРН позволяет заметно увеличить доступный диапазон переданных импульсов, но также сильно усложняет обработку экспериментальных данных: появляется дополнительная степень свободы (по сравнению с монохроматическим МУРН): длина волны нейтрона, определяемая по времени его пролета от системы прерывателей до детектора, за счет использования импульсной структуры пучка.

Доклад посвящен разработке и оптимизации методов обработки данных численных экспериментов, как монохроматических, так и времяпролетных, моделируемых в программе McStas. Основной целью работы является создание алгоритма для обработки экспериментальных данных и построение кривых рассеяния с минимальными потерями точности. Реализация алгоритма выполнена на языке программирования Python.

В качестве виртуального образца использовалась модель монодисперсного раствора твердых сфер радиусов порядка 100 – 1000 ангстрем. Для формирования импульсной структуры (в случае времяпролетного эксперимента) использовалась конфигурация типа "слепая пара" [2] системы прерывателей модели МУРН установки.

Результаты работы включают алгоритм обработки монохроматических и времяпролетных данных численного эксперимента в McStas, обеспечивающий построение кривых рассеяния с наименьшей погрешностью.

1. Schmatz W. et al. Neutron small-angle scattering: experimental techniques and applications //Applied Crystallography. – 1974. – Т. 7. – №. 2. – С. 96-116.
2. Van Well A. A., Fredrikze H. On the resolution and intensity of a time-of-flight neutron reflectometer //Physica B: Condensed Matter. – 2005. – Т. 357. – №. 1-2. – С. 204-207.

Влияние постоянного электрического поля на затухание zitterbewegung в графеновой сверхрешетке

Е.И. Кухарь¹, С.В. Крючков², Н.А. Иванов¹

E-mail: nikita01ivanov@yandex.ru

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет», Волгоград, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», Волгоград, Россия

Дираковские кристаллы являются удобной платформой для изучения эффектов квантовой электродинамики. Одним из таких эффектов являются осцилляции zitterbewegung (ZB). Значительно более низкая частота ZB в графене по сравнению с релятивистским электроном в вакууме существенно облегчает экспериментальное исследование ZB. Для изучения ZB необходимо учитывать следующие обстоятельства. Во-первых, начальный спинор должен представлять собой суперпозицию состояний, отвечающих противоположным знакам собственной энергии электрона. Во-вторых, для получения результатов, сопоставимых с возможными экспериментальными наблюдениями, следует рассматривать электронные волновые пакеты конечной ширины. В последнем случае колебания ZB являются затухающими, причем время затухания напрямую зависит от ширины пакета. В настоящей работе для контроля времени затухания предлагается использовать графеновую СР, помещенную в продольное по отношению к оси СР электрическое поле. Данный путь преодоления затухания ZB обладает рядом преимуществ. Во-первых, графеновые СР уже получены в лабораторных условиях, а их электронные свойства активно изучаются теоретически [1]. Во-вторых, использование постоянного поля вместо переменного, как это предлагалось в [2], может существенно упростить задачу возможной экспериментальной проверки эффектов восстановления ZB.

В работе теоретически исследована возможность увеличения времени ZB электрона в графеновой сверхрешетке (СР). Наложение однородного электрического поля, направленного вдоль оси СР, приводит к нестационарной динамике электронных состояний, описываемой уравнением Дирака с периодическим гамильтонианом [3]. Внешнее поле индуцирует блоховские осцилляции, которые, в сочетании с особенностями спектра сверхрешетки, создают условия для модификации осцилляций ZB. Получены следующие результаты. (1) В резонансном случае, когда блоховская частота совпадает с удвоенной частотой ZB, характер затухания существенно меняется. При этом условии удается обратить в нуль групповую скорость субпакетов, предотвратив тем самым их пространственное разбегание. Как следствие, вместо экспоненциального затухания как у безмассового дираковского электрона амплитуда ZB убывает обратно пропорционально корню из времени. (2) В случае, когда за период блоховских колебаний происходит значительное число осцилляций ZB, возможно периодическое восстановление амплитуды ZB так, что колебания приобретает форму биений. Частота огибающей биений совпадает с частотой блоховских колебаний электрона в минизоне.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда на проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований № 25-22-20071

1. Fernandes D.E. Effective medium model for graphene superlattices with electrostatic and magnetic vector potentials // Physical Review B. – 2023. – Vol. 107. – P. 085119.
2. Rusin T.M., Zawadzki W. Multimode behavior of electron Zitterbewegung induced by an electromagnetic wave in graphene // Physical Review B. – 2013. – Vol. 88. – P. 235404.
3. Krueckl V., Richter K. Bloch-Zener oscillations in graphene and topological insulators // Physical Review B. – 2012. – Vol. 85, No. 11. – P. 115433.

Возбуждение магнитостатических волн на суммарной частоте поверхностных акустических волн в структуре Au/LuIG***В.А. Ковалева, П.И. Геревенков, Я.А. Филатов***

E-mail: valeria.kovaleva@mail.ioffe.ru

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

Спиновые волны представляют собой коллективные когерентные колебания намагниченности. Волновая природа и способность к когерентному взаимодействию с другими фундаментальными возбуждениями [1] в конденсированных средах делают спиновые волны особенно перспективными для модернизации уже существующих и создания принципиально новых вычислительных архитектур [2]. Выраженные нелинейные свойства спиновых волн, относительно легко реализующиеся на практике, открывают возможности для разработки нейроморфных [3] или резервуарных вычислений [4], к которым научное сообщество в последнее время проявляет особый интерес.

Целью работы является экспериментальное исследование процесса взаимодействия магнитостатических и поверхностных акустических волн в структуре лютециевый феррит-гранат, покрытый нанометровой пленкой золота (Au/LuIG).

Экспериментальное исследование взаимодействия спиновых и акустических волн выполнено по методике двуцветной оптической накачки-зондирования с пространственным и временным разрешениями. Спиновые и акустические волны возбуждаются в результате воздействия фемтосекундного лазерного импульса накачки на границу структуры Au/LuIG. Сверхбыстрая магнитная динамика регистрируется измерением угла поворота плоскости поляризации зондирующего импульса при его прохождении через LuIG и отражении от слоя золота в геометрии обратных объемных магнитостатических волн (ОМОВ), в которой направления внешнего магнитного поля и волнового вектора возбуждаемых волн совпадают.

Эксперимент выполнен во внешнем магнитном поле $H = 150$ мТл, направленном под углом 35° относительно легкой оси в плоскости образца. В результате измерений получено пространственно-временное распределение динамики намагниченности и упругих деформаций, анализ которых с использованием двумерного преобразования Фурье демонстрирует дисперсионные зависимости, соответствующие магнитостатическим волнам с частотой 4 ГГц и поверхностным акустическим волнам (ПАВ) в диапазоне до 2.2 ГГц. Полученные дисперсионные зависимости ПАВ соответствуют поверхностной волне Рэлея и квазипродольной акустической волне со скоростями 3.3 км/с и 6.5 км/с, соответственно. На дисперсии также наблюдается акустическая волна на суммарной частоте двух ПАВ, которая имеет пересечение с дисперсией ОМОВ. Равенство частот и волновых векторов приводит к магнитоупругому взаимодействию, в результате которого акустическая волна на суммарной частоте возбуждает магнитостатические волны. Наблюдаемый эффект генерации магнитостатических волн за счет воздействия акустической волны на суммарной частоте также имеет место при различных направлениях и значениях внешнего магнитного поля.

Полученные результаты демонстрируют процесс взаимодействия поверхностных акустических волн и возбуждение магнитостатических волн в результате магнитоупругого взаимодействия с акустической волной на суммарной частоте.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 24-72-00136.

1. Hioki T. et al. Coherent oscillation between phonons and magnons // Communications Physics 2022 V. 5 P. 115
2. G. Finocchio. et al. The promise of spintronics for unconventional computing // Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2021 V. 521 P. 167506
3. Christopher H. Marrows. et al. Neuromorphic computing with spintronics // npj Spintronics 2024 V. 2 P. 12
4. Gouhei Tanaka et al. Recent advances in physical reservoir computing: A review // Neural Networks 2019 V. 115 P. 100-123

И.А. Конищев¹, С.В. Крючков², Е.И. Кухарь¹

E-mail: konishev_igor@mail.ru

¹*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет», Волгоград, Россия*²*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», Волгоград, Россия*

Исследование электронных состояний в дираковских материалах в условиях воздействия переменного электромагнитного поля представляет значительный интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. Дираковские кристаллы и, в частности, графен демонстрируют линейный спектр носителей заряда вблизи точки Дирака, что делает их удобной модельной системой для изучения аналогов эффектов квантовой электродинамики в конденсированных средах [1–3]. Воздействие высокочастотного (ВЧ) излучения позволяет существенно модифицировать электронные свойства, включая появление индуцированных запрещённых зон, смещение дираковских точек и перенормировку скорости Ферми [4–6].

В настоящей работе в рамках формализма Флоке проведены расчёты квазиэнергетического спектра электронов графена, подвергнутого воздействию высокочастотного бихроматического электрического поля. Перенормировка гамильтониана с использованием унитарных преобразований позволила получить эффективный гамильтониан, описывающий динамику «электрон-фотонного» состояния. Показано, что закон дисперсии электронов при этом приобретает анизотропный характер, а скорость Ферми зависит от амплитуды переменного поля.

Существенным результатом является установление роли второй гармоники в спектре излучения. Включение дополнительной частоты позволяет расширить диапазон значений амплитуды поля, при которых перенормировка скорости Ферми корректно описывается полученной формулой. Это повышает устойчивость эффекта по сравнению с воздействием монохроматического поля [7–9]. Таким образом, можно контролировать электронные свойства дираковских кристаллов за счёт изменения параметров внешнего излучения, что открывает возможности для создания новых функциональных наноструктур и моделирования квантово-электродинамических процессов в конденсированных средах.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда на проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований №25-22-20071.

1. Datta B. et al. // Applied Physics Letters. 2021. V. 119. P. 133501.
2. Novikov D.S. // Physical Review B. 2007. V. 76. P. 245435.
3. Фирсова Н.Е., Ктиторев С.А. // Физика твёрдого тела. 2021. Т. 63(2). С. 277.
4. Oka T., Aoki H. // Physical Review B. 2009. V. 79. P. 081406.
5. Kibis O.V. // Physical Review B. 2010. V. 81. P. 165433.
6. Dini K., Kibis O.V., Shelykh I.A. // Physical Review B. 2016. V. 93. P. 235411.
7. Kibis O.V., Morina S., Dini K., Shelykh I.A. // Physical Review B. 2016. V. 93. P. 115420.
8. Кухарь Е.И., Крючков С.В. // Журнал технической физики. 2022. Т. 92. С. 337.
9. Weber C.P. // Journal of Applied Physics. 2021. V. 129. P. 070901.

Магноны Fe в ортоферрите диспрозия DyFeO₃***А.К. Овсяников, О.В. Усманов, И.А. Зобкало***E-mail: ovsianikov_ak@pnpi.nrcki.ru*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В данной работе основное внимание уделено изучению монокристалла ортоферрита диспрозия DyFeO₃ методами неупругого рассеяния нейтронов и рентгеновской дифракции. Кристаллическая структура DyFeO₃ описывается пространственной группой R₃ma. Температура Нееля T_N^{Fe} = 645 K, ниже которой магнитные моменты железа упорядочиваются в магнитную фазу Г4. При понижении температуры происходит единственный спин-переориентационный переход при T_{SR}^{Fe} ~ 50 K, и подсистема Dy упорядочивается около температуры T_N^{Dy} ~ 4 K. До 2022 года считалось, что ниже спин-переориентационного перехода слабый ферромагнитный момент исчезает и возникает магнитная фаза Г1 (Gx, Cy, Az) [1]. Однако в 2022 году были опубликованы две статьи по дифракции нейтронов на порошке [2] и порошке и монокристалле [3]. Обе работы сообщают о наблюдении несоразмерных магнитных структур ниже T_N^{Dy}, но различаются значениями температуры T_{SR}^{Fe} и описанием магнитной фазы ниже T_{SR}^{Fe}. Таким образом, точная магнитная структура DyFeO₃ до сих пор остаётся предметом дискуссий.

Эксперименты по рентгеновской порошковой дифракции проводились на дифрактометре Rigaku SmartLab в Петербургском институте ядерной физики. Измерения сделаны на длине волны 1,54 Å в диапазоне углов 2θ от 20–135° с использованием порошка, полученного измельчением монокристалла. Уточнение структуры проводилось с помощью программного пакета FullProf Suite [4]. Эксперименты с использованием неупругого рассеяния нейтронов проводились на тепловых трехосных нейтронных спектрометрах IN20 в Институте Лауэ-Ланжевена (ILL) [5] и TAIPAN в Австралийской организации ядерной науки и технологий (ANSTO) [6].

Для расчета величин обменных взаимодействий использовалась линейная теория спиновых волн. Уточнения значений параметров обменных взаимодействий проводились в программе SpinW [7]. Полученные значения обменных взаимодействий внутри подсистемы Fe хорошо согласуются с известными значениями для других ортоферритов J_b=4.87 мЭВ J_{ac}=4.46 мЭВ. Основную роль в формировании магнитной структуры ниже температуры Нееля играет суперобмен между ближайшими соседями внутри подрешетки Fe. С понижением температуры полная энергия системы уменьшается и становится эффективным обмен между подрешетками Fe и Dy - J^{Fe-Dy}. Анизотропия подсистемы редкоземельных элементов начинает вносить заметный вклад в общую анизотропию системы, что приводит к переориентации спинов. Тем не менее, из данных по неупругому рассеянию тепловых нейтронов не удаётся определить величину обмена J^{Fe-Dy}, что, вероятно, указывает на её малую величину. Однако из эксперимента были получены энергии уровней кристаллического поля иона Dy³⁺.

1. Y. Tokunaga, S. Iguchi, T. Arima, Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 097205.
2. Clemens Ritter et al 2022 J. Phys.: Condens. Matter 34 265801
3. Biswas B. et al. «Role of Dy on the magnetic properties of orthorhombic DyFeO₃», Physical Review Materials. – 2022
4. Rodríguez-Carvajal, J. Recent Developments of the Program FULLPROF, in Commission on Powder Diffraction (IUCr).
5. <https://www.ill.eu/users/instruments/instruments-list/in20/description/instrument-layout>
6. S. A. Danilkin, G. Horton, R. Moore, G. Braoudakis and M. E. Hagen, J. Neutron Res. 15, 55-60 (2007)
7. S. Toth and B. Lake, J. Phys.: Condens. Matter 27, 166002 (2015)

Актуальность проведения исследований методами нейтронных томографии и радиографии

А. А. Павельева, Е. В. Алтынбаев

E-mail: paveleva_aa@pnpi.nrcki.ru

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

Нейтронная томография (НТ) и радиография (НР) являются неразрушающими методами исследования. Метод нейтронной радиографии основан на регистрации теневых проекций объекта, просвечиваемого нейтронным пучком. Контраст изображения обусловлен вариациями плотности и/или химического состава, и может быть усилен за счет изменения длины волны нейтронного излучения. Данные методы являются широко востребованными в различных областях науки и промышленности [1-3].

Применение нейтронных томографии и радиографии, в качестве методов исследования, открывает возможность исследования образцов и изделий сложных форм без разрушения и деформации, в том числе для обнаружения дефектов, включений, несплошностей во внутренних объемах, что актуально для аддитивных технологий, исследования водородного охрупчивания материалов, для авиационной, судостроительной и автомобильной промышленности, исследований объектов археологии и культуры и т.п. Помимо вышеуказанного, применение данных методов позволяет исследовать микроструктуру объектов, характер распределения фаз, а также, оценивать эффективность материалов радиационной защиты для поглощения нейтронов, исследовать материалы – накопители водорода, аккумуляторы, элементы питания и процессы, протекающие в них в процессе эксплуатации [1-3].

В данном докладе будет отражена актуальность создания станции для томографических и радиографических исследований крупных объектов посредством нейтронного излучения на базе реакторного комплекса ПИК. В докладе рассмотрены некоторые примеры применения НР и НТ, взятые из отечественного и мирового опыта.

Как известно, большое влияние на механические свойства металлов и сплавов оказывает их фазовый состав. Таким образом, благодаря томографическим исследованиям, изменяя применяемую длину волны нейтронов, удалось различить феррит и мартенсит на толщине образца в 1,5 см, что нам демонстрируют авторы работы [3].

Наличие и распределение водорода в металлах долгое время является актуальным вопросом в материаловедении, создании новых конструкционных сплавов и в области изучения материалов-накопителей водорода. Обнаружение водородного охрупчивания в объеме без деформации, так же возможно благодаря применению нейтронной томографии [1].

Дифракционный контраст, лежащий в основе данных методов, возникающий благодаря брэгговскому рассеянию нейтронов на плоскостях исследуемой кристаллической решетки, обычно используется для визуализации фазовых различий и выявления текстурных неоднородностей как в инженерных объектах, так и в артефактах культурного наследия [2].

Стоит отметить, что посредством данных методов также возможно исследовать и магнитные материалы, о чем свидетельствуют результаты авторов в работе [2].

Таким образом, на основе вышеизложенного, можно сделать вывод о высокой актуальности применения методов НТ и НР для проведения широкого спектра исследований как в науке, так и в промышленности, что также сообщает о больших перспективах в создании станции для проведения данных исследований на РК ПИК.

1. Bilheux H. Z. et al. *Advances in Neutron Radiography*. 718. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN. High Temperature Materials Lab. 2016.
2. Kardjilov N. et al. *Advances in neutron imaging*. *Materials Today* T. 21. №. 6. С. 652-672. 2018.
3. Murashev M. M., Glazkov V. P., Em V. T. *Visualization of the Diffraction Contrast between the Ferrite and Martensitic Phases*. *Instruments and Experimental Techniques*. T. 64. №. 3. С. 491-495. 2021.

Формирование sp^2 -гибридизированных включений в структурах 3C-SiC/Si***Н.В. Полонский¹, Н.И. Волюнец¹, Д.В. Городецкий², О.В. Седельникова²***

E-mail: Palonski.Mikita@yandex.by

¹НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Лаборатория НаноЭлектроМагнетизма, Минск, Беларусь²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СОРАН, Новосибирск, Россия

Тонкие пленки карбида кремния на кремнии (3C-SiC/Si) являются перспективными гетероструктурами с уникальными свойствами [1]. С точки зрения приборных применений, гетероструктуры 3C-SiC/Si используются как основа для создания фотоэлектрических приборов, оптических диодов и MEMS-структур [1-2]. Для формирования устройств на основе 3C-SiC/Si важно локально управлять электрофизическими свойствами гетероматериала и, в частности, варьировать электропроводность. В этой связи исследование электрофизических характеристик структур 3C-SiC/Si, а также их модификация, является актуальным в настоящее время. Одним из способов модификации электрофизических свойств структур 3C-SiC/Si является формирование на поверхности 3C-SiC графеноподобного материала [3] методом лазерной обработки. Такой способ обработки позволяет осуществлять контролируемую модификацию поверхности 3C-SiC/Si и не требует использования сверхвысокого вакуума и атмосфер инертного газа [4-5].

Цель данной работы заключается в исследовании морфологии поверхности структур 3C-SiC/Si после формирования sp^2 -гибридизированного углерода методом лазерной обработки.

Тонкие пленки карбида кремния были получены методом высокотемпературной вакуумной карбидизации. Особенностью этого метода является использование углеродосодержащих паров от паромасляного насоса при вакууме ($<5 \times 10^{-3}$ Па). Слои 3C-SiC были сформированы на кремниевой подложке марки КДБ-12/24 с ориентацией поверхности вдоль (100). Температура и уровень вакуума в процессе карбидизации составляли 1000 °C и 4×10^{-3} Па. Длительность синтеза варьировалась от 20 до 60 мин. В результате, на поверхности кремния были получены слои 3C-SiC, толщина которых составляла от 40 до 100 нм. Формирование на поверхности 3C-SiC графеноподобного материала проводилось путем обработки твердотельным импульсным ультрафиолетовым лазером фирмы GrosseMark с длиной волны 355 нм. Обработка проводилась на частоте 150 кГц и мощности 0,3 Вт при различной скорости прохода лазерного луча (от 2000 до 6000 мм/сек). Дополнительно плотность энергии лазерного излучения регулировалась с помощью изменении фокусного расстояния, при этом площадь лазерного пятна варьировалась в диапазоне от 20 до 60 мкм.

Структурный анализ образцов проводили методом комбинационного рассеяния света (КРС). В результате лазерного воздействия на спектрах КРС структур 3C-SiC/Si наблюдается характерный для sp^2 углерода G пик при 1330 см^{-1} . В спектрах также присутствует D пик при 1562 см^{-1} , отвечающий за дефектность. Для образцов 3C-SiC толщиной 100 нм наблюдается 2D-мода при 2677 см^{-1} .

1. Kaloyeros A. E. и др. Silicon Carbide Thin Films: Innovations in Property, Process, and Applications: IntechOpen, 2025.
2. Kaur A., Chahal P., Hogan T. Selective Fabrication of SiC/Si Diodes by Excimer Laser Under Ambient Conditions // IEEE Electron Device Lett. 2016. Т. 37. № 2. С. 142–145.
3. Shteplyuk I. и др. Role of the Potential Barrier in the Electrical Performance of the Graphene/SiC Interface // Crystals. 2017. Т. 7. № 6. С. 162.
4. Avramchuk A. V. и др. Local laser annealing of 3C-SiC film deposited on the silicon substrate by CVD // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2019. Т. 475. С. 012036.
5. Semenov A. V. и др. Change of Electrophysical Properties of Nanocrystalline SiC Films by Laser Treatment at Applied Electric Field // International Scholarly Research Notices. 2013. Т. 2013. № 1. С. 810394.

И.О. Райков, Я.М. Бельтюков

E-mail: IORaikov@gmail.com

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

В настоящее время много внимания уделяется исследованию нанокомпозитов. Композитные материалы получают путём соединения двух или более составляющих с разными физическими и химическими свойствами. К примеру, добавление наночастиц разной формы и размера в полимерную матрицу делает возможным получение легких материалов с выдающимися механическими свойствами. Многие широко используемые полимеры являются стеклообразными, то есть обладающими аморфной структурой при комнатной температуре. Аморфные полимеры отличаются своей жесткостью и прочностью [1], и исследование свойств нанокомпозитов на их основе представляет большой интерес.

Из-за аморфной структуры, физические свойства аморфных полимеров сильно неоднородны на микроскопическом уровне. В результате этого, на достаточно малых масштабах к ним неприменима классическая континуальная теория упругости, что необходимо учитывать при описании нанокомпозитов, в которых этот масштаб неоднородности полимерной матрицы может быть сравним с размером включённых наночастиц. К примеру, известно, что наночастицы оказывают большее влияние на упругие свойства нанокомпозита, чем более крупные включения с той же объёмной долей [2].

Ранее были получены теоретические результаты [3], описывающие эффект повышения упругости материала вблизи жестких нановключений. Этот эффект объясняется подавлением неаффинных деформаций в аморфной матрице вблизи интерфейса со включениями, что приводит к увеличению упругой энергии и, тем самым, жесткости системы. Решение уравнения на упругий контраст $\alpha(\mathbf{r})$ описывается масштабом неоднородности ξ . В настоящей работе были произведены молекулярно-динамические симуляции с целью проверки этих теоретических предсказаний.

Были рассчитаны локальные упругие модули при деформации между жесткими стенками для полистирола и модельных полимеров Кремера-Греста, и показано хорошее соответствие численных результатов теории. Масштаб неоднородности и граничное значение упругого контраста не зависят от толщины слоя между стенками и вида деформации, а только от характеристик самого материала. Изменение изгибной жесткости цепочек полимеров Кремера-Греста влияет на наблюдаемый в них масштаб неоднородности. Увеличение модуля упругости полимерной матрицы вблизи жестких границ может достигать двух раз и проникать вглубь полимерной матрицы на множество межатомных расстояний от границы.

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

1. C.B. Roth (ed.): Polymer Glasses, CRC Press (2017)
2. J. Cho, M.S. Joshi and C.T. Sun, Composites Science and Technology Vol. 66 (2006)
3. D.A. Conyuh, A.A. Semenov, Y.M. Beltukov, Phys. Rev. E Vol. 108 (2023)

Структурные изменения оксида графена с интеркалированными ионами РЗМ под действием СВЧ излучения**Павленко В.И., Серебряков С.В.**

E-mail: serebr43@yandex.ru

Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова, Белгород, Россия

Углеродные наноконпозиты представляют огромный интерес с научной и технической точки зрения, так как позволяют получить широкий спектр функциональных материалов, способных найти применение не только в электронике, но и в защитных материалах.

Графит и графен (а также их производные) могут интеркалироваться как донорами, так и акцепторами электронов. Также стоит помнить, что при интеркаляции дефекты исходной углеродной матрицы переносятся и в интеркаляционные соединения [1].

Интеркаляция объемных частиц может происходить только в случае разрыва межслоевых связей [2].

Целью настоящей работы является изучение структурных изменений в интеркалированной ионами самария углеродной матрице оксида графена.

Раман спектр оксида графена в данном случае состоит из двух характеристических мод: D (~ 1325 см⁻¹) и G (~ 1598 см⁻¹) [2], на основе анализа которых можно делать выводы о количестве дефектов и упорядоченности углеродных структур. Наиболее удобным для отслеживания изменений в Раман-спектрах является параметр ширины на полувысоте максимумов мод (I_D и I_G). Колебательная мода G характеризует степень кристалличности углеродной системы, в свою очередь, D указывает на степень асимметричности системы. По отношению максимумов пиков (I_D/I_G) можно судить об общей неупорядоченности материала [4]. При модификации оксида графена наблюдается увеличение полуширины G пика, что указывает на снижение кристалличности углеродной структуры за счет образования бинарной системы. Также это подтверждают дынные РФА, из которых видно резкое снижение кристалличности пика в районе 12,52° и образование новой фазы, наблюдаемой в районе ~17°. Низкая выраженность новообразованной фазы обусловлена спецификой встраивания ионов РЗМ в структуру углеродной матрицы. При обработке модифицированного оксида графена СВЧ излучением наблюдается аморфизация углеродной структуры. Увеличение степени упорядоченности относительно необработанного модифицированного оксида графена обуславливается стойкостью интеркалята к структурным изменениям под действием микроволнового излучения. Данные РФА также подтверждают аморфизацию материала. Сдвиг менее активного пика с ~17° до ~24° обусловлен изменением структуры углеродной матрицы, однако, его наличие также указывает на стойкость интеркалята к СВЧ излучению.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Минобрнауки России №FZWN-2023-0004 с использованием оборудования на базе Центра высоких технологий БГТУ им. В.Г. Шухова

1. M. Stanley Whittingham. Intercalation chemistry. New York, Academic Press, 1982, - 592p. – ISBN 0-12-747380-7
2. Jovanović, S., Huskić, M., Kepić, D. et al. A review on graphene and graphene composites for application in electromagnetic shielding. Graphene and 2D mater 8, 59–80 (2023). <https://doi.org/10.1007/s41127-023-00065-3>
3. Fazli-Shokouhi, S., Nasirpour, F. & Khatamian, M. J. Polyaniline-modified graphene oxide nanocomposites in epoxy coatings for enhancing the anticorrosion and antifouling properties. Coat Technol Res 16, 983–997 (2019). <https://doi.org/10.1007/s11998-018-00173-3>
4. Rourke JP, Pandey PA, Moore JJ, Bates M, Kinloch IA, Young RJ, Wilson NR. The real graphene oxide revealed: stripping the oxidative debris from the graphene-like sheets. Angew Chem Int Ed Engl. 2011 Mar 28;50(14):3173-7. doi: 10.1002/anie.201007520

Магнитные фазовые переходы в ортоферрите TmFeO_3 по данным нейтронографии в условиях внешнего магнитного поля***К.Ю. Ткаченко^{1,2}, А.К. Овсяников¹, О.В. Усманов¹***

E-mail: tkachenkokirill2@mail.ru

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

Изучение магнитных свойств семейства соединений оксида железа Fe_2O_3 в сочетании с оксидами других металлов стало важным направлением в области материаловедения. В данной работе рассматривается соединение с общей формулой RFeO_3 , где R представляет собой редкоземельный элемент. Эти ферриты характеризуются орторомбической кристаллической решёткой [1], что и обуславливает их название — ортоферриты. Одним из интересных явлений, обнаруженных в ортоферритах является магнитокалорический эффект [2]. Этот эффект описывает изменение температуры магнитного материала в ответ на варьирование внешнего магнитного поля B в адиабатических условиях. Кроме того, установлено, что редкоземельные ортоферриты демонстрируют сегнетоэлектрическую поляризацию при определённых температурах [3], соответствующих магнитному упорядочиванию. В качестве целевого соединения для исследования был выбран тулиевый ортоферрит TmFeO_3 , так как данный образец обладает магнитной анизотропией.

Для исследования предложенного соединения использовалась порошковая рентгеновская дифракция и монокристаллическая дифракция нейтронов во внешнем магнитном поле. Рентгеновский анализ проводился в Петербургском институте ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab. Нейтронный эксперимент выполнялся на дифрактометре D23, расположенном в Institute Laue-Langevin (ILL). Монокристалл ориентировался с помощью автоматического нейтронного дифрактометра Лауэ OrientExpress.

В результате рентгеновского эксперимента была уточнена кристаллическая структура TmFeO_3 . Далее по полученным данным были построены карты электронной плотности для связей Fe-O-Fe и Tm-O-Fe, которые косвенно демонстрируют пути суперобменного взаимодействия. Результатом обработки нейтронного эксперимента, стало построение магнитных фазовых диаграмм тулиевого ортоферрита при воздействии внешнего магнитного поля, направленного вдоль осей b и c .

1. Ю. А. Изюмов, В. Е. Найш, Р. П. Озёров, Нейтронография магнетиков, 1981, т. 2, с. 97
2. Дружинин В.В., Пономарев Б.К., Запаский С.П. Теоретическое и экспериментальное исследование характеристик тербия и диспрозия в сильных магнитных полях // ФТТ, 1977, т. 19, с. 47
3. G. Tang, Z. Li, L. Ma, Three models of magnetic ordering in typical magnetic (2018).

Изучение кристаллической структуры и особенностей магнитного упорядочения в квазидвумерных оксидах $A_2Ni_2TeO_6$ ($A = Li, K$)

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

E-mail: Fokin_ns@pnpi.nrcki.ru

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

Слоистые оксиды семейства $A_2M_2TeO_6$, где A – щелочной, а M – переходный металл, относятся к большому классу квазидвумерных (или природных двумерных) соединений, которые в последние годы всесторонне исследуются из-за их разнообразных, нетривиальных магнитных и транспортных свойств. Благодаря исключительности кристаллического строения, данный класс соединений находит широкое применение в наукоемких областях промышленности [1-2].

В настоящей работе, методом нейтронной порошковой дифракции изучены кристаллическая структура и особенности магнитного упорядочения представителей семейства теллуридов стехиометрического состава $Li_2Ni_2TeO_6$ и $K_2Ni_2TeO_6$.

Серия экспериментов проводилась на нейтронном порошковом дифрактометре G4.1 (LLB, Сакле, Франция) в диапазоне температур 1.5–35 K ($\lambda=2.4283\text{\AA}$) и SPODI (RNS НМ-L, Мюнхен) при температуре $T=1.5$ и 300K ($\lambda=2.5362\text{\AA}$).

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

$Li_2Ni_2TeO_6$ кристаллизуется в орторомбическую пространственную группу $Cmca$, которая относится к типу T2 (где T-тетраэдрическая координация щелочного иона, 2 - период повторяемости слоев при данной упаковке). $K_2Ni_2TeO_6$ кристаллизуется в гексагональную пространственную группу $P6_3/mst$, которая относится к типу P2 (где P - призматическая координация иона калия, а остальные обозначения аналогичны).

Обе кристаллические конфигурации характеризуются попеременным чередованием магнитоактивных слоев, состоящих из ионов Ni^{2+} и Te^{6+} с немагнитоактивными слоями, содержащими ионы щелочных металлов

С использованием подхода базисных векторов неприводимых представлений (BASIREPS, программный пакет Fullprof), были предложены решения в виде магнитных структур на основании экспериментальных нейтронограмм, измеренных при температуре $T=1.5$ K. Модели представляют собой сотовую слоистую структуру, внутри которой реализуется упорядочение типа “страйп”, где присутствуют выделенные полосы антиферромагнитно и ферромагнитно упорядоченных магнитных моментов (для образцов $Li_2Ni_2TeO_6$ и $K_2Ni_2TeO_6$ соответственно) ионов никеля, лежащих в одной плоскости. Вдоль кристаллографического направления оси с магнитоактивные соты расположены в шахматном порядке. Обменное взаимодействие между ионами никеля, предположительно, реализуется за счет механизмов Крамерса-Андерсона и супер-супер обменного взаимодействия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, грант №24-12-00217

1. Tarascon J. M., Armand M. Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries //nature. – 2001. – Т. 414. – №. 6861. – С. 359-367.
2. Васильев А.Н., Волкова О.С., Зверева А.А., Маркина М.М. Низкоразмерный магнетизм. М.: Физматлит, 2018, 304 с.

Исследование локальной геометрии Rh-содержащего цеолита ZSM-5 с использованием нейросети CHGNet

Б.Ю. Янжимаев, А.А. Велигжанин

E-mail: yanzhimaevborya@yandex.ru

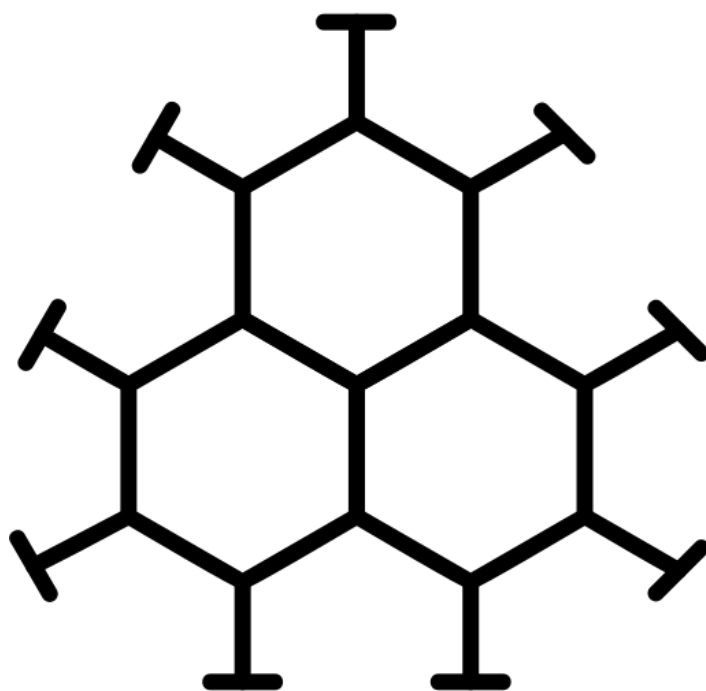
НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Для изучения каталитических свойств Rh-содержащих цеолитов необходимо учитывать особенности локального окружения активных центров, так как именно структура ближайшего окружения атомов Rh определяет активность и селективность в реакциях окислительной конверсии метана и образования кислородсодержащих продуктов [1,2]. Одним из эффективных инструментов моделирования локальной структуры является использование нейросетевых межатомных потенциалов, которые позволяют получать геометрии с сопоставимой точностью при существенно меньших вычислительных затратах чем при использовании расчетов методом функционала плотности.

В работе рассматривается применение предобученной модели CHGNet [3] для оптимизации локальной структуры Rh-содержащего цеолита ZSM-5. Основное внимание уделяется анализу влияния исходных условий моделирования – таких как величина случайных атомных возмущений и радиус выбранного кластера – на устойчивость и воспроизводимость оптимизаций. Полученные конфигурации локальной структуры планируется использовать для дальнейших расчётов спектров рентгеновского поглощения (XANES/EXAFS) и их сопоставления с экспериментальными данными.

1. Bunker G. Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy. – Cambridge University Press, 2010.
2. Храмов Е.В. и др. Synchrotron Radiation Techniques for Catalysts and Functional Materials, Novosibirsk, Russia, Oct 31 – Nov 3, 2022.
3. Deng B. et al. CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling // Nat. Mach. Intell. – 2023. – Т. 5, № 9. – С. 1031–1041.

Функциональные и наноструктурированные материалы



Дицианоаргентаты(I) как акцепторы галогенных связей***И.С. Алиярова¹, Н.С. Солдатова², Д.М. Иванов¹***

E-mail: i.aliyarova@spbu.ru

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия²Томский политехнический университет, Томск, Россия

Кристаллохимический дизайн представляет собой междисциплинарную область научных исследований, направленную на создание супрамолекулярных структур и материалов с заданными свойствами. Особое внимание в настоящее время уделяется изучению нековалентных взаимодействий как ключевого фактора формирования супрамолекулярных ансамблей с уникальными физико-химическими характеристиками, пригодных для практического использования [1–4]. В последние годы активно изучается природа нековалентных взаимодействий с участием псевдогалогенидных комплексных соединений металлов, в том числе дицианоаргентатов(I), которые могут быть использованы для создания систем со выраженными фотофизическими, проводящими, магнитными и другими свойствами [5, 6].

В работе представлены результаты синтеза и исследования дицианоаргентатов(I) диарилиодония [PhMesI][Ag(CN)₂] (**1**), [Mes₂I][Ag(CN)₂] (**2**) и [(4-MeC₆H₄)MesI][Ag(CN)₂] (**3**). Вещества были закристаллизованы из смеси дихлорметана и диэтилового эфира (**1**), а также метанола (**2**, **3**) путём медленного упаривания при комнатной температуре, их структуры были подтверждены с помощью рентгеноструктурного анализа на монокристаллах. Во всех структурах были обнаружены взаимодействия C–I...N≡C, которые были отнесены к галогенным связям. Наличие и природа контактов были подтверждены данными рентгеноструктурного анализа и квантово-химическими расчётами с периодическими граничными условиями и учётом релятивистских эффектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 24-73-00143).

Авторы выражают благодарность ресурсным центрам «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования» научного парка СПбГУ.

1. Desiraju G.R., Ho P.S., Kloo L., Legon A.C., Marquardt R., Metrangolo P., Politzer P., Resnati G., Rissanen K. // *Pure and Applied Chemistry*. 2013. V. 85, P. 1711–1713.
2. Gilday L.C., Robinson S.W., Barendt T.A., Langton M.J., Mullaney B.R., Beer P.D. // *Chemical Reviews*. 2015. V. 115, P. 7118–7195.
3. Cavallo G., Metrangolo P., Milani R., Pilati T., Priimagi A., Resnati G., Terraneo G. // *Chemical Reviews*. 2016. V. 116. P. 2478–2601.
4. Brammer L. // *Faraday Discussions*. 2017. V. 203. P. 485–507.
5. Shylin S.I., Kucheriv O.I., Shova S., Ksenofontov V., Tremel W., Gural'skiy I.A. // *Inorganic Chemistry*. 2020. V. 59, P. 6541–6549.
6. Dechambenoit P., Ferlay S., Kyrtsakasa N., Hosseini M.W. *CrystEngComm*. 2011, V. 13, 1922–1930.

Анализ барьерного эффекта защитных покрытий для борьбы с обезуглероживанием поверхности при физическом моделировании длительного изотермического отжига с использованием дилатометрического метода анализа.

Д.М.Анисимов¹, С.Н.Петров¹, С.П.Богданов²

E-mail: mail@crism.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

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

При назначении режимов термической обработки крупногабаритных стальных деталей необходима информация о кинетике распада аустенита, которая может быть получена на основе количественного анализа фазового состава. Физическое моделирование медленного непрерывного охлаждения и изотермического отжига с фиксацией фазовых превращений по дилатации позволяет получить необходимую информацию [1].

С использованием дилатометров DIL 805 и «DIL 402 Expeditis Supreme» проведена серия дилатометрических испытаний малых образцов среднеуглеродистых сталей по температурно-временным режимам, моделирующим процессы нагрева и охлаждения крупногабаритных заготовок. В результате установлено, что при выдержке в течение 30-50 часов в интервале температур 650-700 °С происходит значительное обезуглероживание поверхностного слоя (до 2 мм). Для минимизации этого процесса, не позволяющего переносить результаты, полученные на малых образцах, на крупногабаритные стальные детали, проведен поиск барьерных покрытий, подавляющих диффузию углерода из приповерхностных слоев исследуемых сталей. Проведена оценка барьерного эффекта для покрытий из никеля, палладия, высокотемпературных герметика и лака по глубине обезуглероженного слоя и содержанию углерода в приповерхностных слоях, определяемого методом абсорбционной ИК-спектроскопии. Установлено, что покрытия из никеля и высокотемпературного лака не обеспечивают защиту от обезуглероживания. Покрытие из палладия, химически нанесенного на поверхность, и высокотемпературного герметика снижают глубину обезуглероженного слоя с 2,0 мм. до 0,3 - 1,0 мм. Покрытие алюминия, нанесенного на поверхность образца методом газотранспортного иодидного переноса, толщиной около 100 мкм обеспечило наилучшую защиту поверхностного слоя от обезуглероживания. Данное покрытие позволило снизить глубину поверхностного обезуглероженного слоя с 2 мм до 0,1-0,15 мм, что не оказывает значимого влияния на дилатацию образца диаметром 9 мм и результаты количественной оценки фазовых превращений [2].

Установлено, что алюминиевые покрытия, наносимые на поверхность методом газотранспортного иодидного переноса, проявляют значительный барьерный эффект, предотвращающий диффузию углерода из поверхностных слоев малого образца при длительных выдержках в интервале температур 650-700 °С. Это позволяет использовать их для физического моделирования на малых образцах режимов термической обработки и кинетики распада аустенита по результатам количественного фазового анализа, получаемого на основе анализа дилатограмм.

1. МВИ №31-2/41-2023/068 «Анализ дилатометрических кривых для расчета кинетики фазовых превращений низколегированных конструкционных сталей при непрерывном охлаждении».
2. Анисимов Д.М., Петров С.Н. Анализ изменений фазового состава крупногабаритных поковок в процессе длительных изотермических выдержек и медленного охлаждения на основе модельных дилатометрических экспериментов // XX ежегодная конференция молодых ученых и специалистов «Новые материалы и технологии»: тезисы докл. (СПб, 28-29 июня 2023 г.) – Санкт-Петербург, 2023 – С. 3.

В.В. Анферова¹, А.М. Шикин¹, А.В. Тарасов^{1,2}

E-mail: st085003@student.spbu.ru

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

Магнитные топологические изоляторы (ТИ) представляют значительный интерес для исследований, поскольку сочетают в себе нетривиальную зонную топологию и магнитный порядок [1]. Благодаря этому в них проявляется ряд интересных эффектов, среди которых квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [2]. Одним из наиболее изучаемых примеров такой системы является антиферромагнитный ТИ MnBi₂Te₄. Его энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в топологических поверхностных состояниях (ТПС) является одним из ключевых факторов наличия КАЭХ в системе и теоретически оценивается в диапазоне 80-88 мэВ [3]. Однако, в дальнейших исследованиях было показано, что величина ЭЗЗ значительно зависит от различных факторов [4], и в реальных системах оказывается меньше 88 мэВ, в том числе из-за наличия в реальных кристаллах дефектов на поверхности.

В данной работе будет исследован интерфейс: Au/MnBi₂Te₄, так как нанесение на поверхность MnBi₂Te₄ слоя тяжелых атомов Au может скомпенсировать уменьшение ЭЗЗ в реальных системах. Похожий подход уже был использован в некоторых экспериментальных исследованиях. Например, в работе [5] было показано, что при нанесении Au на поверхность Bi₂Se₃ ТПС в полученных образцах остаются устойчивыми. Цель этой работы заключается в теоретической оценке возможности модулирования величины ЭЗЗ в ТПС кристалла MnBi₂Te₄ при контакте с адслоем Au в зависимости от: конфигурации расположения нанесенных атомов, их концентрации и расстояния до поверхности MnBi₂Te₄.

В работе представлены и проанализированы изменения электронной структуры MnBi₂Te₄ при контакте с адслоем Au. Полученные результаты показывают, что при таком контакте наблюдаются выраженные изменения в электронной структуре исследуемой системы. Определяющим фактором является энергетическое положение зон адслоя. Расчеты, выполненные в рамках теории функционала плотности (ТФП), показывают, что если его энергетические уровни находятся ниже или выше точки Дирака, то ТПС сохраняются; однако, если состояния адслоя оказываются вблизи точки Дирака, то наблюдается их гибридизация с ТПС, приводящая к тому, что конус Дирака более не наблюдается. При этом было обнаружено, что при определенных условиях может наблюдаться существенное увеличение ЭЗЗ (в 2-3 раза). Также при больших концентрациях Au ТПС в системе исчезают, однако на их место приходят Рашба-подобные состояния или эффект сильной внеплоскостной поляризации от слоя Au, которые локализованы в объемной запрещенной зоне MnBi₂Te₄.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ (исследовательский проект 125022702939-2).

1. M. Z. Hasan, C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. P. 3045–3067.
2. C.-Z. Chang, et al. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator // Science. 2013. V. 340. P. 167–170.
3. M. M. Otrokov, et al. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // Nature. 2019. V. 576. P. 416–422.
4. A. Shikin, et al. Routes for the topological surface state energy gap modulation in antiferromagnetic MnBi₂Te₄ // Physica B. 2023. V. 649. P. 414443.
5. O. Clark, et al. Robust behavior and spin-texture stability of the topological surface state in Bi₂Se₃ upon deposition of gold // npj Quantum Mater. 2022. V. 7. P. 36.

Функционализация наноалмазов детонационного синтеза бис[3-(триметоксисилил)пропил]амином

Артемьева В.А.^{1,2}, Евдокимова Е.Н.²

E-mail: veranikaartemeva@gmail.com

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

²Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова Научно-исследовательского центра Курчатовского института - Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время ведутся активные разработки в области создания гидрофобных покрытий для защиты металлических поверхностей от коррозии. Благодаря низкому сродству к воде такие покрытия эффективно препятствуют проникновению коррозионных агентов внутрь покрытий. Одним из методов повышения гидрофобности является включение в состав покрытий специальных добавок. Например, в качестве подобной добавки широко применяются детонационные наноалмазы (ДНА). Их введение в покрытия повышает физико-механические свойства, также они легко поддаются химической модификации благодаря наличию большого количества поверхностных функциональных групп, включая гидроксильные [1,2].

Целью нашего исследования является оценка влияния включения добавки на основе ДНА модифицированных бис[3-(триметоксисилил)пропил]амином (БТМСПА) в состав эпоксидных покрытий.

Синтез наночастиц осуществлялся за счёт взаимодействия ДНА и модификатора БТМСПА при массовом соотношении 1:3. Реакция проводилась при комнатной температуре в среде этанола при перемешивании в течение 24 часов. После окончания реакции модифицированные наноалмазы отделяли от раствора центрифугированием и промывали этанолом [3]. Полученные наночастицы ДНА-БТМСПА были исследованы методом ИК-Фурье спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии, а также был проведён тест на дисперсию.

На следующем этапе работы синтезированные модифицированные ДНА-БТМСПА были введены в состав циклоалифатической эпоксидной матрицы при 1, 3, 5 и 10 масс. % для дальнейшей оценки физико-механических и гидрофобных свойств.

Лучшие результаты угла смачивания (94°) и физико-механических свойств при лабораторных испытаниях удалось достичь в случае состава 5 масс. % модифицированных наноалмазов. С целью повышения физико-механических свойств и увеличения сплошности покрытия в этот состав были введены наполнители – слюда-мусковит содержанием 15 масс. % и диоксид титана содержанием 5 масс. %. Прочность при ударе увеличилась с 35 до 41 см, прочность при изгибе улучшилась с 20 до 1 мм.

Состав на основе циклоалифатической эпоксидной матрицы с содержанием ДНА-БТМСПА 5 масс. % и наполнителями был отправлен для изучения антикоррозионных свойств в натуральных условиях. Образцы с покрытием были установлены на открытой бетонной площадке и в закрытой микологической площадке. За 9 месяцев испытаний на поверхности покрытия не наблюдается появление следов коррозии, цвет покрытия не изменился. На данный момент испытания продолжаются.

1. Krueger A., Lang D. Functionality is Key: Recent Progress in the Surface Modification of Nanodiamond // Advanced Functional Materials. 2012. V. 22. P. 890-906.
2. Rahmani P., Shojaei A., Tavandashti N. P. Nanodiamond loaded with corrosion inhibitor as efficient nanocarrier to improve anticorrosion behavior of epoxy coating // Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2019. V. 77. P. 153-163.
3. Song P., Yu Y., Wu Q., Fu S. Facile fabrication of HDPE-g-MA/nanodiamond nanocomposites via one-step reactive blending // Nanoscale Research Letters. 2012. V. 7. Art. 355. P. 1-7.

Полимерные композиты с высоким содержанием керамических наполнителей для 3Д-печати микроволновых элементов

Балабанова Е.А.^{1,2}, Тимошенко М.В.¹, Долгин А.С.¹, Тюрнина Н.Г.¹, Тюрнина З.Г.^{1,2}, Тумаркин А.В.², Балабанов С.В.¹, Ахматнабиев М.Ф.¹, Сычев М.М.¹, Дроздовский А.В.²

E-mail: balabanova.e.a@yandex.ru

¹ Институт химии силикатов им. И.В. Гребенищикова (филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ), Санкт-Петербург, Россия

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

Для полноценной реализации потенциала полимерных композитов в СВЧ применениях необходимо решить ключевую материаловедческую задачу по созданию филаментов для 3Д-печати с управляемыми и прогнозируемыми механическими и диэлектрическими характеристиками. Стандартные термопласты, такие как АБС, обладая отличными механическими и технологическими свойствами, имеют диэлектрическую проницаемость в районе $\epsilon \approx 2.5-3.0$, что является отправной точкой для дальнейших модификаций. Основная сложность заключается в том, чтобы, повышая диэлектрическую проницаемость путем введения наполнителей, сохранить не только приемлемый для целевых приложений уровень потерь, но и механическую прочность и технологичность композита, необходимые для стабильной и качественной 3Д-печати [1, 2].

Целью данного исследования является разработка технологии получения и комплексная характеристика композиционных материалов на основе полимеров ABS и СБС с оксидными керамическими наполнителями TiO_2 и $SrTiO_3$ для аддитивного производства, а также установление фундаментальных зависимостей «состав – структура – свойства».

В ходе работы успешно синтезированы полимерные композиты на основе ABS и СБС пластиков с титаносодержащими оксидными керамическими наполнителями (TiO_2 и $SrTiO_3$), перспективные для 3Д-печати методом FDM и обладающие совокупностью характеристик, необходимых для применения в СВЧ-устройствах. Полученные композитные материалы продемонстрировали диэлектрическую проницаемость ($\epsilon = 2.5-8.2$), уровень СВЧ-потерь ($\tan \delta = 0.010-0.026$) и механическую прочность, достаточные для изготовления из них конструктивных элементов СВЧ устройств методом 3Д-печати. Данные рентгенофазового анализа подтвердили отсутствие химического взаимодействия между матрицей и керамическими наполнителями. Результаты исследований показали, что переход к эластичным матрицам (СБС) целесообразен лишь для достижения сверхвысоких концентраций (>40%), без существенного улучшения диэлектрических свойств.

Результаты работы получены в рамках государственного задания на НИР №1024030700034-2-1.4.3 и №1024031700022-6-1.4.3.

Результаты исследований, связанные с изготовлением филамента наполненного керамикой, его 3Д-печатью и изучение физико-механических свойств, выполнены в рамках государственного задания - №1024030700040-3-1.4.3.

Результаты исследований, связанные с экспериментальными исследованиями электрических свойств, выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках темы № FSEE -2025-0010.

1. Timoshenko M V., Balabanov S V., Sychev MM, Nikiforov DI (2021) Thermoplastic Elastomer for 3D Printing by Fused Deposition Modeling. Polymer Science - Series A 63:652–656.
2. Tumarkin A V., Sinelshchikova OYu, Zigankova DI, et al (2024) Ferroelectric Composites of $BaTiO_3$ and $SrTiO_3$ with the Low-Melting Additive B_2O_3 . Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics 88:687–692.

С.Г. Шемардов, А.В. Беклемишева, А.Л. Васильев, В.Н. Беклемишев, П.А. Александров

НИИЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

В работе исследованы закономерности изменения морфологии поверхности и развития пористой структуры монокристаллического кремния при высокодозной имплантации ионами гелия и последующем термическом отжиге. Определены критические дозы имплантации, превышение которых приводит к разрушению поверхности по механизму флекинга. Полученные результаты имеют практическое значение для создания структур кремний-на-изоляторе (SOI) и кремний-ни-на-чем (SON). [1-4]

Ключевые слова: ионная имплантация, гелий, кремний, пористость, блистеринг, флекинг, КНИ (SOI), морфология поверхности.

Высокодозная имплантация монокристаллического кремния ионами гелия с последующим высокотемпературным отжигом при 1000°C приводит к образованию развитой пористой структуры образцов в использованном диапазоне флюенсов $1-2 \times 10^{17}$ см⁻². Начиная с флюенса 2×10^{17} см⁻² происходит формирование цепочек пор, расположенных параллельно поверхности, с наибольшим размером пор ~155 нм. Морфология поверхности кремния, имплантированного в режиме 1×10^{17} см⁻² после отжига при 1000°C, не изменяется, увеличение флюенса до 2×10^{17} см⁻² приводит к интенсивной поверхностной эрозии кремния по механизму флекинга. Несмотря на то что не удалось получить неразрушенного поверхностного слоя кремния, имплантированного большой дозой гелия, определены критические дозы имплантации для образцов без и с постимплантационным отжигом, при превышении которых наблюдаются нарушения поверхностного слоя. Для предотвращения этого явления необходимы дальнейшие методы оптимизации параметров имплантации и отжига, такие как метод последовательных имплантаций докритических доз ионов гелия и отжигов.

1. Alix K., David M.-L., Dérès J. et al. // Phys. Rev. B. 2018. V. 97. № 10. P. 104102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.104102>
2. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2010. V. 268. № 11. P. 1818. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.02.091>
3. Griffin P.J. // 16th European Conference on Radiation and Its Effects on Components and Systems (RADECS). 2016. P. 1. <https://doi.org/10.1109/RADECS.2016.8093101>
4. Arganda-Carreras I., Kaynig V., Ruedenot C. et al. // Bioinformatics. 2017. V. 33. № 15. P. 2424. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx180>

Синтез и исследование нанокомпозита полиакриламидный гидрогель/углеродные квантовые точки***А.М. Бородина, С.В. Костромин, С.В. Бронников***

E-mail: Anastasia_2998@mail.ru

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

Углеродные квантовые точки (УКТ) являются хронологически последними известными представителями углеродных наночастиц. Благодаря своим свойствам, они могут быть применены для производства полимерных нанокомпозитов, предназначенных для использования в оптоэлектронных устройствах, устройствах для хранения энергии, в суперконденсаторах, а также для экологических применений [1,2].

Одним из минусов УКТ является их склонность к агрегации в водной среде, что существенно уменьшает интенсивность флуоресценции. Для устранения этой проблемы УКТ диспергируют в полимерных матрицах.

В данной работе УКТ были получены путем пиролиза лимонной кислоты при температуре 200 °С и времени синтеза 4 ч [3]. Полученные и очищенные УКТ были исследованы методами УФ-, ИК- и Раман-спектроскопии. Данными методами было подтверждено образование УКТ с карбонизированным ядром и кислородсодержащими группами на поверхности. Для полученных УКТ были сняты спектры фотолюминесценции (ФЛ) при разных длинах волн возбуждения (λ_{ex}). Определено, что максимум интенсивности ФЛ наблюдается при $\lambda_{\text{ex}} = 380$ нм с квантовым выходом 6,7%.

Полученные УКТ в количестве 0,1 масс.% были использованы как наполнители в гидрогелях на основе полиакриламида (сшиватель – N,N'-метиленабисакриламид). После введения в гидрогель УКТ равномерно диспергировались в объеме гидрогеля и сохраняли свои фотолюминесцентные свойства [4]. Для определения фотолюминесцентных свойств полученного нанокомпозитного гидрогеля (ПААГГ/УКТ) были сняты спектры ФЛ при различных длинах волн возбуждения. Установлено, что наибольшая интенсивность ФЛ наблюдается при длине волны возбуждения 340 нм. Полученный нанокомпозитный гидрогель (ПААГГ/УКТ) был исследован методами УФ-, ИК- и фотолюминесцентной спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и использован для обнаружения ионов Fe^{3+} в водных растворах FeCl_3 разной концентрации. Был рассчитан предел обнаружения Fe^{3+} в воде, который составил 0,763 нмоль/л, что значительно меньше предельно допустимой концентрации (ПДК) в воде (5,3571 мкмоль/л). Это позволяет использовать ПААГГ/УКТ в качестве хемосенсоров для мониторинга ионов железа Fe^{3+} в водных средах.

1. Hebbbar A. et al. A Critical Review on the Environmental Applications of Carbon Dots // Chemosphere. 2022. V. 313. No. 137308.
2. Wang Y. et al. Carbon Dot-Based Hydrogels: Preparations, Properties, and Applications // Small. 2023. V. 19. No. 2207048.
3. Kostromin S., Borodina A., Podshivalov A., Pankin D., Zhigalina O., Bronnikov S. Characterization of Carbon Quantum Dots Obtained through Citric Acid Pyrolysis // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2023. V. 31. P. 931-939.
4. Borodina A., Kostromin S., Pankin D., Povolotskiy A., Ushakova E., Bronnikov S. Carbon Quantum Dots-loaded Fluorescent Hydrogel for Fe^{3+} Ions Detection // International Journal of Environmental Analytical Chemistry. 2024. [электронный журнал].

Инновационный метод поверхностной модификации поли-L-лактидных скаффолдов для регенеративной медицины***А.А.Брюзгина¹, О.А.Лапуть¹, Д.А.Зуза², И.А. Курзина¹***

E-mail: bryuzgina2016@mail.ru

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия²Институт Сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

Использование волокнистых скаффолдов на основе поли-L-лактида (ПЛ) является перспективным направлением в тканевой инженерии благодаря высокой биосовместимости, биоразлагаемости и удовлетворительным механическим свойствам данного полимера. Однако гидрофобность поверхности и недостаток функциональных групп ограничивают применение ПЛ скаффолдов в раневых покрытиях [1]. Для преодоления этих ограничений применяют комбинированные методы поверхностной модификации: первичную активацию плазмой тлеющего разряда в атмосфере азота с последующей иммобилизацией биоактивных молекул, таких как гиалуроновая кислота (ГК). Плазменная обработка активирует поверхность полимера, формируя полярные азотсодержащие группы (амино- и иминные), обеспечивающие стабильное ковалентное связывание биомолекул и улучшение биосовместимости материала [2].

В работе проведено сравнительное исследование влияния концентрации ГК, иммобилизованной на поверхности скаффолдов ПЛ, предварительно обработанных азотной плазмой тлеющего разряда, на физико-химические свойства материалов. Образцы из ПЛ с молекулярной массой 150 тыс. г/моль были изготовлены методом электроспиннинга, параметры процесса были следующие: приложенное напряжение – 27 кВ, скорость подачи раствора – 1,5 мл/ч; концентрация полимера в растворе – 5 масс.%. Плазменную обработку проводили в течение 5 минут при использовании специализированного плазмохимического оборудования. Иммобилизацию ГК из водных растворов с концентрациями 0,25–0,5 масс.% проводили в течение суток с последующей сушкой образцов.

Результаты смачивания показали значительное улучшение гидрофильности ПЛ после плазменной обработки (снижение краевого угла смачивания (КУС) на 30°) и увеличение поверхностной энергии (ПЭ) (с 4,4 до 116,5 мН/м). Наличие ГК на поверхности дополнительно повысило гидрофильность материалов благодаря естественным увлажняющим свойствам полисахарида. Данные рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) выявили формирование азота на поверхности образцов после плазменной обработки (18 ат.%). С увеличением концентрации ГК в растворе содержание азота снижается до 12,4 ат.%, что свидетельствует о том, что ГК не формирует пленку на поверхности, а проникает внутрь волокон, вызывая их набухание.

Таким образом, применение комбинированной обработки поверхности обеспечивает требуемую гидрофильность и химическую функциональность поверхности скаффолдов ПЛ, что открывает перспективы для разработки эффективных биосовместимых раневых покрытий.

Работа выполнена при поддержке Государственного задания Минобрнауки России, проект No FSWM-2025-0013. Работа выполнена при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030).

1. Yang Z. et al. Medical applications and prospects of polylactic acid materials //Iscience. 2024. Vol. 27, №. 12, p.111512.
2. Khomutova U. V. et al. Nitrogen plasma treatment of composite materials based on polylactic acid and hydroxyapatite //Polymers. 2024. Vol 16, №. 5, p. 627.

Применение кремниевых барьерных слоёв для стабилизации интерфейсов многослойных структур Ti/Ni

А.В. Бугаев¹, С.С. Сахоненков¹, Е.О. Филатова¹

E-mail: bugaev.sasha99@mail.ru

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

Многослойные системы Ti/Ni являются перспективными материалами для рентгеновской [1] и нейтронной оптики [2] благодаря высокому рентгено- и нейтронно-оптическому контрасту. Однако формирование протяжённых переходных слоёв на границах раздела Ni–Ti, снижает оптические и функциональные характеристики структур [3]. Одним из наилучших способов для стабилизации интерфейсов в многослойных структурах является метод введения тонких барьерных слоев между исходными материалами. В данной работе представлено комплексное исследование влияния ультратонких кремниевых барьерных слоёв кремния на формирование переходных слоёв в многослойных структурах Ti/Ni с периодами 4 и 10 нм.

Для анализа использовались взаимодополняющие методы: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) (Курчатовский институт, Москва), рентгеновская дифрактометрия (РД) и рентгеновская рефлектометрия (РЦ «Рентгенодифракционные методы исследования», СПбГУ, Санкт-Петербург), SQUID-магнитометрия (РЦ «Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники», СПбГУ, Санкт-Петербург).

Исследование показало, что в структурах Ti/Ni без барьерных слоёв формируются асимметричные переходные слои протяженностью до 1.5 нм на границе Ni-на-Ti и до 0.85 нм на границе Ti-на-Ni, состоящие преимущественно из интерметаллида Ni₃Ti. В структуре с периодом 10 нм также обнаружено образование небольшого количества фазы NiTi₂.

Введение Si-прослоек номинальной толщиной 0.3–0.4 нм значительно подавляет образование интерметаллических фаз. Данные РФЭС и РД свидетельствуют, что кремний взаимодействует с титаном с образованием силицидов, что предотвращает взаимную диффузию Ni и Ti. Также наблюдается существенное уменьшение поверхностных оксидов Ni и Ti благодаря пассивирующему действию поверхностного оксида кремния.

Магнитометрические измерения показали, что в структурах с Si-барьерами увеличивается остаточная намагниченность и коэрцитивная сила. Это связано с сохранением большего объёма ферромагнитного Ni, поскольку подавляется образование немагнитных интерметаллических фаз.

Таким образом, использование ультратонких кремниевых барьерных слоёв эффективно стабилизирует границы раздела в системах Ti/Ni, подавляет образование интерметаллидов, улучшает магнитные свойства и обеспечивает защиту от окисления. Эти результаты открывают перспективы для создания высокоэффективных многослойных зеркал для рентгеновского и нейтронного излучения с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 24-72-10107.

1. J. H. Underwood, T. W. Barbee, C. Frieber, X-ray microscope with multilayer mirrors, Appl. Opt. 25 (1986) 1730, <https://doi.org/10.1364/AO.25.001730>.
2. Z. Zhong, W. Zhan-Shan, Z. Jing-Tao, C. Schanzer, M. Schneider, P. Boni, Neutron optics: towards applications for hot neutrons, J. Phys. Conf. Ser. 746 (2016) 012024, <https://doi.org/10.1088/1742-6596/746/1/012024>.
3. Y. Yang, R. Qi, Z. Zhang, Y. Yao, H. Ni, Z. Wang, H. Wu, X. Wang, Ni-Ti supermirror coated onto a curved substrate for nested neutron-focusing optics, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 986 (2021) 164752, <https://doi.org/10.1016/J. NIMA.2020.164752>.

Нековалентные взаимодействия с участием металлоцентра в комплексах платины(II) с хелатирующими лигандами

А.А. Бусыгина, А.А. Елисеева, А.В. Рожков

E-mail: st077081@student.spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Водородная связь и π -стэкинг – всесторонне изученные типы нековалентных взаимодействий, которые уже нашли практическое применение в различных областях науки и промышленности, включая катализ, разработку фармацевтических препаратов и кристаллохимический дизайн. Однако в последние десятилетия наблюдается рост числа публикаций, посвящённых и другим, менее изученным типам межмолекулярных контактов, таким как галогенная связь и её аналоги, семикоординационная связь, металлофильные взаимодействия [1]. Стоит отметить, нековалентные взаимодействия с металлоцентром остаются малоизученными, хотя они также могут выступать эффективным инструментом для применения в кристаллохимическом дизайне [2]. Доступность d_z^2 -орбиталей металла в плоско-квадратных комплексах платины(II) делает их удобными объектами для конструирования супрамолекулярных систем на основе нековалентных взаимодействий с участием металлоцентра [3].

В нашей работе [4] были синтезированы два новых комплекса платины(II) – $[\text{Pt}(\text{PPy})(\text{S}_2\text{CN}(\text{CH}_2)_n)]$ (PPy – 2-фенилпиридин; $n = 4, 6$). Данные комплексы были сокристаллизованы с различными полифункциональными донорами σ/π -дырок, в результате была получена серия новых кристаллических аддуктов. Структуры полученных сокристаллов были исследованы методом рентгеноструктурного анализа (РСА) на монокристаллах.

Методами РСА в кристаллических структурах аддуктов были обнаружены различные типы нековалентных взаимодействий. Помимо широко известного π - π стэкинга и контактов $\text{Te}\cdots\text{S}$, $\text{I}\cdots\text{S}$, были выявлены малоизвестные двухцентровые галогенные связи $\text{I}\cdots\text{Pt}^{\text{II}}$ и бифуркатные галогенные связи $(\mu_2\text{-I})\cdots[\text{Pt}^{\text{II}},\text{S}]$ с участием металлоцентра, халькогенные связи $\text{Te}\cdots\text{Pt}^{\text{II}}$, а также впервые была обнаружена бифуркатная халькогенная связь $(\mu_2\text{-Te})\cdots[\text{Pt}^{\text{II}},\text{S}]$. Нековалентная природа данных взаимодействий была подтверждена посредством квантово-химических расчётов, включая топологический анализ распределения электронной плотности в рамках теории Бейдера, расчёт функции локализации электронов, анализ сравнения минимумов электронной плотности и электростатического потенциала вдоль связевых путей, а также анализ молекулярного электростатического потенциала для изолированных молекул металлокомплексов и доноров нековалентных взаимодействий.

Авторы выражают благодарность РЦ «Рентгенодифракционные методы исследования», РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования» и РЦ «Методы анализа состава вещества» Санкт-Петербургского государственного университета за проведение физико-химических исследований.

1. Zhao Y. et al. Unorthodox Interactions at Work // J. Am. Chem. Soc. 2016. V. 138. No. 13. P. 4270–4277.
2. Ivanov D.M. et al. Metal Centers as Nucleophiles: Oxymoron of Halogen Bond-Involving Crystal Engineering // Chemistry A European J. 2022. V. 28. No. 2. P. e202103173.
3. Eliseeva A.A. et al. Engineering metal site behavior: electrophilic-nucleophilic dualism in square-planar platinum(II) through geometry-controlled switching // Dalton Trans. 2025. V. 54. No. 22. P. 9076–9087.
4. Busygina A.A. et al. Synergistic σ/π -Hole Interactions Directing Supramolecular Assembly: Tellurium $\cdots$ Platinum Chalcogen Bonding Enhanced by π -Stacking // Crystal Growth & Design. 2024. V. 24. No. 24. P. 10235–10246.

Влияние параметров гидротермальной обработки на формирование гидросиликатов $\text{Ni}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$, допированных Zn

И.Д. Быстревский¹, Е.К. Храпова², О.В. Альяшева¹

E-mail: bis-ilja2009@yandex.ru

¹Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов им. И.В. Гребенникова», Санкт-Петербург, Россия

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

В области химии силикатов возрастает интерес к созданию материалов с новыми или значительно улучшенными функциональными характеристиками. Одним из путей разработки материалов с заданными свойствами может быть допирование нанотрубулярных гидросиликатов со структурой хризотила атомами, например, 3d-элементов [1,2]. С этой точки зрения представляет интерес исследование возможности изоморфного замещения атомов никеля в структуре синтетического пекораита $\text{Ni}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ цинком. Введение в структуру гидросиликата никеля цинка может расширить область его применения и позволит использовать материал и в качестве катализатора, в частности фотокатализатора.

Введение допанта в состав исходной смеси может существенно влиять как на температурно-временные рамки формирования гидросиликатного материала, так и на общий фазовый состав системы. Поэтому проблема подбора оптимальных условий для получения нанотрубулярного гидросиликата никеля, допированного цинком, представляется достаточно актуальной. В данной работе рассмотрено влияние температуры и продолжительности гидротермальной обработки на процесс формирования гидросиликата никеля-цинка.

Гидросиликаты состава $(\text{Ni}_x\text{Zn}_{1-x})_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$, где $x = 0,95; 0,90$, получали методом гидротермального синтеза, на основе подхода применяемого для получения нанотрубок гидросиликата никеля [1]. Для предотвращения пространственного разделения элементов прекурсорами для синтеза выступали смешанные гидроксиды $\text{Ni}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{OH})_2$ и метасиликаты $\text{Ni}_x\text{Zn}_{1-x}\text{SiO}_3$, полученные методом обратного осаждения из смеси водных растворов хлоридов никеля (NiCl_2) и цинка (ZnCl_2). В качестве осадителя выступали гидроксид натрия NaOH и метасиликат натрия Na_2SiO_3 соответственно. Гидротермальную обработку гидросиликатов проводили при температуре 350-400 °С и давлении 70 МПа в среде 1% водного раствора NaOH . Продолжительность изотермической выдержки составляла 24-72 часа.

Результаты элементного анализа полученных материалов свидетельствуют о том, что в результате гидротермальной обработки соотношение Ni/Zn соответствует заданному в пределах погрешности использованных методов синтеза и анализа.

По данным РФА при содержании в системе 5 мол % Zn фиксируются рефлексыв отвечающие гидросиликату никеля со структурой хризотила, рентгеновских максимумов каких-либо других фаз не наблюдается. По данным электронной микроскопии при увеличении продолжительности обработки наблюдается увеличение доли частиц трубчатой морфологии. Увеличение количества Zn в системе приводит к появлению рефлексов, отвечающих силикату цинка Zn_2SiO_4 . Однако при повышении, как длительности обработки, так и температуры доля кристаллитов Zn_2SiO_4 заметно снижается.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ-ИХС (тема № 1024030700042-1-1.4.3).

Авторы благодарят инжиниринговый центр СПбГТУ(ТИ) и Даниловича Д.П. за предоставленную возможность использования приборной базы.

1. Корыткова Э.Н., Пивоварова Л.Н. // Физика и химия стекла. 2010. Т. 36, № 1. С. 53-60.
2. Кургузкина М.Е., Масленникова Т.П., Гусаров В. В. // Неорганические материалы. 2023. Т. 59, №10. С. 1111-1120.

Влияние агрегатного состояния необлученных и облученных фуллеренолов на их антирадикальную активность

А.А.Василевская^{1,2}, О.Костерова^{1,2}, Ж.Б. Лютова^{1,2}

E-mail: vasilevskaya.andzela@yandex.ru

¹*Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург*

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

Ключевой проблемой современной медицины является поиск эффективных радиопротекторов и антиоксидантов в связи с усилением воздействия неблагоприятных факторов, таких как загрязнение окружающей среды и лучевая терапия. Центральную роль в повреждении клеток играют активные формы кислорода (АФК). Их генерация в результате метаболических процессов или под влиянием внешних агентов может инициировать разрушение клеточных структур и способствовать развитию ряда заболеваний [1].

Перспективность фуллеренолов, полигидроксильированных форм фуллерена C₆₀, в биомедицине связана с их уникальным антиоксидантным действием. В отличие от традиционных антиоксидантов, они окисляются медленнее, что обеспечивает пролонгированную защиту от активных форм кислорода. Способность снижать перекисное окисление липидов, защищать ДНК, а также водорастворимость и иммуносовместимость открывают широкие возможности для их применения в качестве цитопротекторных наноматериалов. [2].

Одним из методов стерилизации фармацевтических препаратов является обработка ионизирующим излучением. Однако, влияние этого процесса на стабильность и свойства активных фармацевтических препаратов требует тщательного изучения. Целью данной работы явилось исследование влияния электролучевой обработки на антиоксидантную активность и устойчивость водных растворов фуллеренола.

Водные растворы фуллеренола облучали на линейном импульсном электронном ускорителе дозой 25 кГр, соответствующей стандартам стерилизации медицинских изделий, для изучения влияния ионизирующего излучения. Антирадикальную активность фуллеренолов определяли по их способности ингибировать восстановление стабильного радикала дифенилпикрилгидразида (DPPH). Антиоксидантную активность фуллеренолов в отношении гидроксильных радикалов оценивали методом обесцвечивания метилового фиолетового. Для генерации гидроксильных радикалов использовали модифицированную реакцию Фентона на основе ионов хрома. Для оценки антиоксидантной активности фуллеренолов в отношении синглетного кислорода использовали метод, основанный на окислении дифенилизобензофурана. Источником синглетного кислорода служила фотосенсибилизированная реакция с использованием бенгальского розового и зелёного лазера. Снижение скорости обесцвечивания дифенилизобензофурана в присутствии фуллеренола свидетельствовало об их антиоксидантных свойствах.

Результаты показали, что облучение на линейном импульсном электронном ускорителе в исследованной дозе не привело к значительной потере антиоксидантной активности фуллеренола. Это свидетельствует о перспективности применения фуллеренолов в качестве антиоксидантных добавок в фармацевтических препаратах, подвергающихся радиационной стерилизации.

1. Lobo, V.; Patil, A.; Phatak, A.; Chandra, N. Free radicals, antioxidants and functional foods: Impact on human health. *Pharmacognosy Reviews* 2010, 4(8), 118-126.
2. Эффекты воздействия водорастворимых форм фуллеренов и их производных на метаболизм растений и урожайность сельскохозяйственных культур // Ямскава О.В. [и др.] // Успехи современной биологии. – 2023. – Т.143, №2, С. 165-179.

Твердотельный нанопоровый сенсор для исследования одиночных биологических молекул**Н.В. Ваулин¹, Л.М. Друян², П.К. Афоничева³, Д.В. Лебедев^{1,3}, А.С. Букатин^{1,3}, И.С. Мухин¹**

E-mail: nikitavaylin@mail.ru

¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алфёрова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия²Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия³Институт аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Сенсоры одиночных молекул на основе наноразмерных пор являются перспективной технологией, находящей все большее применение в областях молекулярной биологии, генетики, хранения энергии и информации, а также в направлениях исследований протеомики и трансмембранных процессов [1,2]. Представляя наноразмерные отверстия в мембранах, разделяющих собой два объема с раствором электролита, твердотельные нанопоры способны обнаруживать и анализировать свойства широкого класса биологических молекул, включая нуклеиновые кислоты и белки. Принцип нанопорового детектирования заключается в регистрации изменений уровня ионного тока, возникающих при перекрытии молекулами аналита внутреннего объема поры [3].

Целью работы является разработка методов детектирования и анализа различных биологических молекул с помощью твердотельного нанопорового SiN_x сенсора.

Для изготовления высокочувствительного нанопорового сенсора была отработана методика формирования сплошных свободноподвешенных SiN_x мембран толщиной ~30 нм на кремниевых подложках. В полученных мембранах, методом травления материала мембраны сфокусированным электронным пучком, формировались одиночные нанопоры заданного диаметра. Электрические измерения проводились в водных растворах 0.1 М KCl + 0.01М PBS (1:1) с помощью Ag/AgCl электродов в потенциостатическом режиме.

Первый этап работ заключался в детектировании молекул ДНК различной длины, проходящих через SiN_x нанопору диаметром ~ 5 нм, под действием приложенного электрического поля. Продемонстрирована возможность детектирования и идентификации молекул ДНК длиной 500 и 5000 пар оснований, чье медианное время прохождения через пору составило 1,09 мс и 1,7 мс соответственно.

На втором этапе работ был разработан способ фиксации одиночных белковых молекул в SiN_x нанопорах, диаметром 8-10 нм, под действием приложенного электрического поля. В качестве белков были выбраны молекулы 20S протеасомы длиной 15 нм и диаметром 11,5 нм, которые могли удерживаться в области поры в течение длительного времени, чему соответствовало снижение величины ионного тока более 70%. Механизм фиксации белков был также изучен на примере малых молекул МВР и РА28, продемонстрировавших различную динамику фиксации, что может быть связано с различающимся электрическим зарядом данных молекул. Возможность фиксации одиночных белковых молекул в области поры открывает перспективы исследования функциональной и конформационной динамики белков в реальном времени без необходимости их физической и химической модификации, а также без использования флуоресцентных меток.

1. Deamer D., Akeson M., Branton D. Three decades of nanopore sequencing // Nature Biotechnology, 2016. Vol. 34, № 5. P. 518–524.
2. Xue L. et al. Solid-state nanopore sensors // Nature Reviews Materials. Nature Research, 2020. Vol. 5, № 12. P. 931–951.
3. Liang L. et al. Overview of the materials design and sensing strategies of nanopore devices // Coordination Chemistry Reviews, 2023. Vol. 478. P. 214998.

**Заполнение нанотрубок со структурой хризотила смешанного состава
(Mg_{0.95}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄, (Ni_{1-x}Mg_xCu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄, (Ni_{1-x}Mg_xFe_{0.05}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄ в
процессе их формирования**

Э.Н. Гатина

E-mail: gatina.en@iscras.ru

Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» – Институт химии силикатов им. И.В. Гребениčkова», Санкт-Петербург, Россия

Синтез гидросиликатов смешанного состава проводился в гидротермальных условиях по схеме, аналогичной использованной при получении нанотрубок гидросиликата магния со структурой хризотила из гидроксидов магния и оксида кремния и в соответствии с рекомендациями по синтезу магниевых-никелевых гидросиликатных нанотрубок [1].

В качестве компонентов исходной смеси были использованы смешанные гидроксиды состава Ni_{1-0.1-x}Mg_xFe_{0.05}Cu_{0.05}(OH)₂, где $x = 0.1; 0.2 \dots 0.8$, полученные методом обратного осаждения с использованием смеси хлоридов магния, никеля, железа и меди с NaOH. Кремнийсодержащий компонент – Na₂SiO₃·5H₂O, добавлялся в систему в десятипроцентном избытке по сравнению со стехиометрией конечного продукта (Mg_{0.95}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄, (Ni_{1-x}Mg_xCu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄, (Ni_{1-0.1-x}Mg_xFe_{0.05}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄. Нанотубулярные частицы были получены гидротермальной обработкой при температуре 350 °C и давлении 70 МПа в среде водного NaOH (1.5 масс. %) за 24 ч.

Данные просвечивающей электронной микроскопии для образца номинального состава (Ni_{0.95-x}Mg_xCu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄, где $x=0.9$ показывают, что в большинстве случаев синтезированные образцы представлены многослойными трубками с полым внутренним каналом. В ходе работы проводился анализ полученных изображений, путем измерения длины (L), внутреннего (d) и внешнего (D) диаметра каждой нанотубулярной частицы в отдельности и построения гистограмм распределения частиц по размерам: $L_{cp}=192\pm103$ нм, $D_{cp}=32\pm6$ нм, $d_{cp}=7\pm1$ нм и $S_{расч}=58$ м²/г для образца номинального состава (Ni_{0.05}Mg_{0.9}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄, синтезированного с использованием Na₂SiO₃·5H₂O и $L_{cp}=181\pm104$ нм, $D_{cp}=39\pm22$ нм, $d_{cp}=9\pm2$ нм и $S_{расч}=103$ м²/г для образца номинального состава (Ni_{0.05}Mg_{0.85}Fe_{0.05}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄. В первом образце наблюдается заполнение внутренних каналов всех нанотрубок мелкими частицами до 1-3 нм, предположительно наночастицами оксида меди CuO, когда как в другом образце зафиксированы отдельные частицы оксида железа Fe₃O₄ на поверхности нанотрубок до 4-6 нм. Двухкомпонентный образец Mg-Cu-гидросиликата (Mg_{0.95}Cu_{0.05})₃Si₂O₅(OH)₄ синтезируется в виде более длинных монофазных цилиндрических частиц с пустым каналом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-00445.

1. Корыткова Э.Н., Пивоварова Л.Н. // Физика и химия стекла. 2010. Т. 36, № 1. С. 53-60.
2. Кургузкина М.Е., Масленникова Т.П., Гусаров В. В. // Неорганические материалы. 2023. Т. 59, №10. С. 1111-1120.

Композиты на основе полимерных трековых мембран с ориентированными металлическими нанопроволоками для приложений терагерцовой фотоники

Г. В. Горохов¹, Н. И. Волинец¹, А. В. Мельников¹, И. М. Долуденко², Д. Л. Загорский²

E-mail: gleggorokhov@yandex.ru

¹НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

²Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Бурное развитие систем высокоскоростной беспроводной связи, наряду с применениями в биологии, материаловедении и системах безопасности обуславливает актуальность исследований в области использования электромагнитного (ЭМ) излучения терагерцового (ТГц) диапазона частот. Перспективными для данных применений являются композиты, содержащие ориентированные микро- и наночастицы [1,2]. К таким материалам относятся рассмотренные в данной работе композиты на основе полимерных трековых мембран (ТМ) с металлическими нанопроволоками (НП) различного диаметра и геометрии, получаемые методом матричного синтеза [3,4]. Данные композиты демонстрируют сочетание выраженного взаимодействия с ЭМ излучением с лёгкостью, гибкостью и малой (~10 мкм) толщиной, что делает их привлекательным для построения устройств ТГц фотоники [4].

В данной работе рассматривается взаимодействие композитов на основе ТМ с металлическими НП различной длины, диаметра, концентрации и пространственной ориентации с линейно поляризованным ТГц излучением. Измерение в диапазоне 0,1–1 ТГц показало, что для композитов, содержащих наклонные НП, характерна зависимость коэффициента пропускания ТГц излучения от угла между направлением его поляризации и плоскостью наклона НП в композите. Среди всех рассмотренных типов композитов данная зависимость наиболее выражена для композитов, содержащих НП, наклонённые под углом $\pm 30^\circ$ в одной плоскости. В такой геометрии возможно пересечение нанопроволок, ведущее к формированию анизотропной перколяционной сети, причём процесс её формирования существенным образом зависит от длины, диаметра и концентрации НП в композите.

Полученные экспериментальные и модельные зависимости существенно приближают возможность применения композитов на основе ТМ с металлическими НП в качестве поляризаторов, аттенуаторов и фильтров ТГц диапазона.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований No Ф24М-013, госзадания Курчатовского Института.

Авторы благодарят П. Ю. Апеля (ОИЯИ, г. Дубна) за предоставление образцов мембран различных типов и В. В. Артёмова (КИ, г. Москва) за РЭМ исследования.

1. Arjmand M. et al. Electrical and electromagnetic interference shielding properties of flow-induced oriented carbon nanotubes in polycarbonate // Carbon. 2011. Т. 49, № 11. С. 3430–3440.
2. Sedelnikova O.V. et al. Laser Patterning of Aligned Carbon Nanotubes Arrays: Morphology, Surface Structure, and Interaction with Terahertz Radiation // Materials. 2021. Т. 14, № 12. С. 3275.
3. Apel P. Track etching technique in membrane technology // Radiation measurements. Elsevier, 2001. Т. 34, № 1–6. С. 559–566.
4. Zagorskiy D.L. et al. Ensembles of Layered Nanowires, Obtained by Matrix Synthesis Technique, for Generation of THz Irradiation // IEEE Trans. Magn. 2022. Т. 58, № 2. С. 1–5.

**Иммобилизация единичных белковых молекул с помощью
твердотельного нанопорового сенсора**

Л.М. Друян¹, Н.В. Ваулин², А.С. Букатин^{2,3}, И.С. Мухин², Д.В. Лебедев^{2,3}

E-mail: lidia.druy@gmail.com

¹Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

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

³Институт аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

Одиночные нанопоры стали передовым инструментом для детектирования отдельных биомолекул. В то время как секвенирование ДНК является наиболее известным применением [1], анализ белков и их комплексов представляет собой перспективную область, направленную на изучения функциональной динамики этих молекул.

Используемые в работе нанопоры представляли собой одиночные отверстия диаметром 8-10 нм, сформированные в SiNx мембранах толщиной 30 нм. Мембрана с порой разделяла два независимых объема электролита (0.1М KCl:PBS (1:1)) измерительной ячейки, приложение разности потенциалов к которым давало возможность измерять ионный ток через пору.

Нахождение белковой молекулы в область поры может приводить к изменению уровня ионного тока, вплоть до полной блокировки наноканала. Проведенное исследование демонстрирует, что блокировка поры является не артефактом, а информативным сигналом, напрямую зависящим от заряда молекулы [2].

В работе исследовались белковые молекулы: 20S протеасомы с молекулярной массой ~700 кДа и отрицательным зарядом; PA28 с молекулярной массой ~26 кДа и имеющей сильный отрицательный заряд; MBP с молекулярной массой ~18,5 кДа и с положительным зарядом. В ходе эксперимента были также исследованы комплексы: 20S-PA28, PA28-MBP и 20S-PA28-MBP. Выяснено, что в случае положительного заряда молекулы пора не блокируется как в случае с MBP. В случае отрицательного заряда пора блокируется только на одной из полярностей прикладываемого напряжения как в случае с 20S протеасомой и комплексами PA28-MBP, 20S-PA28-MBP. В случае сильного отрицательного заряда молекул, пора блокируется на обоих полярностях как в случае молекул PA28 и комплекса 20S-PA28. Таким образом было показано, что ключевым аспектом, определяющим взаимодействие молекул с нанопорой, является не только их размер, но и их заряд.

Развитие метода иммобилизации одиночных молекул в твердотельных нанопорах позволяет исследовать образование специфических мультибелковых комплексов, а также открывает новые возможности по исследованию функциональной динамики иммобилизованных молекул в реальном времени.

1. Schneider G.F., Dekker C. DNA sequencing with nanopores // Nature Biotechnology, 2012. Vol. 30, № 4. P. 326–328.
2. Firnkes M. et al. Electrically facilitated translocations of proteins through silicon nitride nanopores: Conjoint and competitive action of diffusion, electrophoresis, and electroosmosis // Nano letters, 2010. Vol. 10, № 6. P. 2162–2167.

Получение и исследование сцинтилляционной керамики на основе сложных оксидов со структурой граната $(\text{Gd,Y,Lu})_3(\text{Al,Ga})_5\text{O}_{12}:\text{RE}$ и $\text{Lu}_2\text{CaMg}_2(\text{SiO}_4)_3:\text{RE}$

В.В. Дубов¹, В.Д. Белоусова¹, П.В. Карпюк¹, И.Ю. Комендо^{1,2}, М.В. Коржик^{1,3}

E-mail: valery_dubov@mail.ru.

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия

³Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

Соединения структурного типа граната перспективны для применения в качестве сцинтилляторов благодаря высокому световому выходу (десятки тысяч фот./МэВ), быстрой кинетике высвечивания (десятки нс) и плотности (свыше 6 г/см³ для ряда соединений) [1]. Данные материалы могут быть получены в форме прозрачной керамики, которая обладает рядом преимуществ перед монокристаллами: возможностью получения материалов многокомпонентных составов, сниженной температурой производства, более простой механической обработкой. Переход от двойных систем (YAG, LuAG) к более сложным (GAGG, GYAGG и другим) разупорядоченным позволяет улучшить сцинтилляционные свойства и даёт возможность гибко управлять ими [2, 3].

В данной работе получали и исследовали керамику состава $(\text{Gd,Y,Lu})_3(\text{Al,Ga})_5\text{O}_{12}$ с различным соотношением компонентов, активированного ионами Ce^{3+} и Mg^{2+} (GYLAGG:Ce,Mg). Синтез оксидных порошков проводили методом совместного осаждения из азотнокислых раствором с последующей обработкой осадка при температурах более 800 °С. Порошки измельчали в планетарной мельнице, подвергали одноосному прессованию и спеканию в атмосфере кислорода при температурах свыше 1700 °С. Полученные прозрачные керамические образцы шлифовали и полировали, а затем исследовали их функциональные характеристики. Результаты оценки сцинтилляционных свойств показали, что частичное замещение Gd на Y и Lu в базовом составе $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}$ позволяет увеличить световой выход сцинтилляций с ~ 30 000 до ~ 38 000 фот./МэВ. Со-активация состава ионами Mg^{2+} способствует ускорению кинетики с ~ 80 до ~ 55 нс за счёт сокращения медленных компонент.

Альтернативным направлением развития разупорядоченных систем выступает получение силикатных гранатов. Их преимуществом является невысокая температура плавления (менее 1600 °С), что важно для удешевления производства материала. В рамках данной работы получали соединения $\text{Lu}_2\text{CaMg}_2(\text{SiO}_4)_3:\text{RE}$ с различными активаторами (RE = Ce, Tb, Pr). Синтез осуществляли модифицированным золь-гель методом: в золь SiO_2 вносили необходимые количества порошков, содержащих Lu, Ca, Mg, и активатор в виде раствора нитрата. Полученную смесь переводили в гель при нагревании, сушили до постоянной массы, подвергали обработке при температурах свыше 800 °С, измельчению в планетарной мельнице, одноосному прессованию и спеканию при температурах свыше 1300 °С. В докладе будут представлены результаты первичных исследований полученных материалов: фазовый состав, микроструктура и люминесцентные свойства.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 25-73-30014, <https://rscf.ru/en/project/25-73-30014/>. Аналитические исследования выполнены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИИЦ «Курчатовский институт».

1. Gektin A. Inorganic scintillators for detector systems / A. Gektin. – Berlin, Germany: Springer, 2017. – P.20-77
2. Kamada K. et al. Composition Engineering in Cerium-Doped $(\text{Lu,Gd})_3(\text{Ga,Al})_5\text{O}_{12}$ Single-Crystal Scintillators // Crystal Growth & Design. 2011. Vol. 11, № 10. P. 4484–4490.
3. Chewpraditkul W. et al. Luminescence properties and scintillation response in Ce^{3+} -doped $\text{Y}_2\text{Gd}_1\text{Al}_{5-x}\text{Ga}_x\text{O}_{12}$ (x = 2, 3, 4) single crystals // Journal of Applied Physics. 2014. Vol. 116, № 8. P. 083505.

Исследование сцинтилляционных свойств новых материалов для детекторов нейтронного излучения

А.В. Захарова^{1,2}, И.Ю. Комендо^{1,2}, М.В. Коржик^{1,3}

E-mail: anna.v.zaharova@mail.ru

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

² *Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

³ *Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь*

В настоящее время ведется поиск сцинтилляционных материалов, которые применяются в качестве чувствительных элементов для различных детекторов ионизирующих излучений, в том числе нейтронов. Для детектирования нейтронного излучения сцинтилляционным методом необходимы соединения, не только люминесцирующие под действием ионизирующего излучения, но и содержащие атомы с высоким сечением захвата нейтронов. Такими атомами являются изотопы ${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$, в ходе ядерных реакций с нейтронным излучением они образуют регистрируемые частицы: альфа-частицы, тритоны (ядра атомов трития) и гамма-кванты [1].

В ходе работы были получены литий- и борсодержащие соединения: $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4:\text{Eu}$, $\text{LiYSiO}_4:\text{Ce}$, $\text{B}_2\text{O}_3:\text{Pr}$, $\text{B}_2\text{O}_3:\text{Tb}$, $\text{B}_2\text{SiO}_5:\text{Pr}$, $\text{B}_2\text{SiO}_5:\text{Tb}$. Были проанализированы структурные, люминесцентные свойства данных материалов. Также были оценены свойства, необходимые для создания конкурентоспособных детектирующих материалов: световой выход, кинетика сцинтилляций.

При исследовании $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4:\text{Eu}$ в целях повышения его световыхода были исследованы методы стабилизации иона Eu в двухвалентном состоянии. Обнаружено, что внесение добавок оказывает влияние на люминесцентные свойства соединения, а именно позволяет увеличить интенсивность люминесценции на 50 %. Также для этого соединения был рассмотрен метод композиционного разупорядочения — замещения части ионов Ca^{2+} на ионы Sr^{2+} . Что также привело, к увеличению интенсивности люминесценции соединения.

На основе $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4:\text{Eu}$ и сцинтилляционного пластика EJ-200 был создан прототип рабочего тела детектора антинейтринного излучения, который способен детектировать продукты реакции обратного бета-распада и успешно разделять их по форме импульса [2].

Также работе изучали зависимость светосбора и пространственного разрешения сцинтиллятора силиката лития-кальция $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4:\text{Eu}$ под нейтронным излучением от размера частиц и толщины слоя. Было установлено, что светосбор данного материала составляет порядка 25 % от коммерческого сцинтиллятора, представляющего собой смесь сульфида цинка и фторида лития при гораздо более быстрой кинетике сцинтилляций. Наилучшее зарегистрированное пространственное разрешение составило 340 мкм. Данные о светосборе образцов, были получены в Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований на станции нейтронной визуализации ДРАКОН реактора ИР-8.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (№ 22-13-00172-П)

Аналитические исследования выполнены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ «Курчатовский институт».

Автор выражает Благодарность всему коллективу отдела неорганических технологий, курчатовского комплекса физико-химических технологий НИЦ «Курчатовский институт».

1. Neutron scattering lengths and cross sections // NIST Center for Neutron Research URL: <https://www.ncnr.nist.gov/resources/n-lengths/> (дата обращения: 18.05.2025).
2. Fedorov, A.; Bondarau, A.; Borisevich, E.; Lagutskiy, I.; Komendo, I.; Kozemyakin, V.; Litvinovich, E.; Mechinsky, V.; Rastimeshin, A.; Retivov, V.; Skorokhvatov, M.; Korzhik, M. Evaluation of New $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4:\text{Eu}$ / Scintillation Plastic Phoswich for Combined Alpha-Beta and Gamma-Neutron Detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 2024, 1069, 169983. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2024.169983>.

Фазовое рассогласование при генерации второй оптической гармоники за счет эффекта Максвелла-Вагнера в ионообменных стеклах***Г. Кан^{1,2}, С.А. Щербак^{1,2}, А.Н. Терпицкий^{1,2}, А.А. Липовский^{1,2}***

E-mail: gennadiykang@gmail.com

¹Академический университет им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

Классическими нелинейно-оптическими средами для генерации второй гармоники (ГВГ) являются кристаллы без центра симметрии. Стекло, которое является широко используемым оптическим материалом, в силу центральной симметрии для ГВГ непригодно. Однако модификация приповерхностной области стекла посредством термической поляризации позволяет нарушить его изотропию и придать ему ответственную за ГВГ квадратичную оптическую восприимчивость, близкую по значению к восприимчивости кристаллов кварца [1]. В этом случае ГВГ протекает за счёт разрешенного в centrosymmetrical средах нелинейного процесса третьего порядка, в котором участвуют два фотона фундаментальной частоты и статическое электрическое поле, «замороженное» в стекле после термической поляризации [2]. Недавно ГВГ была продемонстрирована [3] в стеклах, структурированных ионным обменом (ИО). «Замороженное» электрическое поле формировалось в ионообменном стекле при комнатной температуре после приложения к нему электрического напряжения за счёт эффекта Максвелла-Вагнера (МВ) [4], заключающегося в накоплении неравновесного заряда на границе областей с различающейся электропроводностью (немодифицированный объём стекла и приповерхностная область, обогащённая инвазивными ионами при ИО). В настоящей работе в процессе ИО к стеклу также прикладывалось постоянное напряжение, что позволило сформировать близкий к ступенчатому, а не диффузионный, профиль проводимости.

Целью данной работы является поиск оптимальных для ГВГ размеров ионообменной области. С одной стороны, увеличение глубины ИО увеличивает размер нелинейной области, с другой – усиливает деструктивный эффект от фазового рассогласования падающей фундаментальной волны и генерируемой волны второй гармоники, что и определяет необходимость такой оптимизации. В рамках исследования выполнялся расчет ожидаемых глубин ИО, электростатических полей МВ и формы угловых зависимостей сигнала ГВГ (т.н. полосы Мейкера) с учетом рассогласования фаз [5]. Далее проводились электростимулированная диффузия калия в натрий-содержащие стекла, измерение концентрационных профилей ионов калия, оценка зарядов и «замороженных» полей и измерения полос Мейкера. Были определены глубина ИО и угол падения фундаментальной волны, максимизирующие выход сигнала второй гармоники, также оценена длина когерентности для ГВГ в ИО-стекле.

Предложенный подход к обеспечению условий квазифазового синхронизма и оптимизации эффективности преобразования оптической частоты применим для любых прозрачных тонких пленок, в том числе полимерных.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки, проект FSRM-2023-0009.

1. Myers R.A., Mukherjee N., Brueck S.R.J. Large second-order nonlinearity in poled fused silica // Opt. Lett. 1991. V. 16, № 22. P. 1732.
2. Kazansky P.G., Kamal A., Russell P.S.J. High second-order nonlinearities induced in lead silicate glass by electron-beam irradiation // Opt. Lett. Optica Publishing Group, 1993. V. 18, № 9. P. 693–695.
3. Scherbak S. et al. Maxwell–Wagner effect and second harmonic generation in gradient structures // J. Am. Ceram. Soc. Wiley Online Library, 2024. V. 107, № 8. P. 5569–5577.
4. Iwamoto M. Maxwell–Wagner Effect BT - Encyclopedia of Nanotechnology / ed. Bhushan B. Dordrecht: Springer Netherlands, 2014. P. 1–13.
5. Jerphagnon J., Kurtz S.K. Maker Fringes: A Detailed Comparison of Theory and Experiment for Isotropic and Uniaxial Crystals // J. Appl. Phys. American Institute of Physics, 1970. V. 41, № 4. P. 1667–1681.

**Использование алгоритмов машинного обучения
для анализа вторичных фаз, образующихся при термическом старении 12% Cr-стали**

К.К. Карпенко, С.Н. Петров, М.С. Михайлов

E-mail: karpenko.ks.k@gmail.com

НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» им. И.В. Горынина, Санкт-Петербург, Россия

Актуальность работы обусловлена необходимостью прогнозирования свойств материалов, работающих в условиях длительного воздействия высоких температур, приводящих к выделению вторичных фаз, вызывающих охрупчивание [1]. Исследование направлено на оценку возможности использования алгоритмов машинного обучения для идентификации вторичных фаз после термического старения при температурах 550°C, 600°C и 625°C с различным временем выдержки.

Методика исследования включала использование растровой электронной микроскопии с системой Oxford Instruments AZtecFeature, обеспечивающей сбор информации о морфологии и элементном составе частиц [2]. Размеры анализируемых частиц лежат в диапазоне от 50 нм до 800 нм, что при традиционном подходе позволяет оценить лишь изменение содержания каких-либо элементов относительно среднего состава стали. Использование системы AZtecFeature позволяет накопить большой массив данных (до нескольких тысяч частиц), а алгоритмы машинного обучения позволяют структурировать его на основе кластерного анализа ряда параметров, полученных для отдельной частицы. Результаты позволяют произвести идентификацию фаз на основе средних параметров полученных кластеров.

В ходе работы были получены данные по элементному и фазовому составу частиц после различных режимов термического старения. Достоверность идентификации выявленных типов частиц подтверждена с использованием просвечивающей электронной микроскопии. Показана эффективность кластерного анализа для идентификации вторичных фаз, образующихся при термическом старении 12% Cr-стали.

1. Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В., Астафурова Е.Г., Шевяко Н.А., Литовченко И.Ю. Особенности микроструктуры феррито-мартенситной (12% Cr) стали ЭК-181 после термообработок по разным режимам // Журнал технической физики. 2012. Т. 82, № 1. С. 52-58
2. Сидоренко Т.И., Возная В.И., Белаш Ю.С., Ермаченок Е.В. Автоматический анализ неметаллических включений в стали с помощью электронного микроскопа с энергодисперсионным микроанализатором // Литье и металлургия. 2022. № 1. С. 64-69

**Новые сорбенты на основе сверхсшитых со- и терполимеров стирола
для решения аналитических и экологических задач**

А.С. Кириллов, Н.И. Горшков, В.Д. Красиков

E-mail: a.kirillov2622@gmail.com

Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» - Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Россия

Актуальной задачей современной аналитической химии и экологии является разработка эффективных сорбционных материалов для концентрирования и определения загрязняющих веществ в объектах окружающей среды и технологических растворах, а также эффективная очистка сточных вод от различных загрязнителей. Перспективным направлением в этой области является создание сорбентов на основе сверхсшитых полимеров (ССП), обладающих высокоразвитой поровой структурой и исключительной сорбционной емкостью, механической прочностью, химической устойчивостью, возможностью регенерации, а также совместимостью с любыми водными и органическими средами [1]. Кроме того, СПП позволяют проводить направленное регулирование поровой [2] и модификацию химической структуры [3], что позволяет рассматривать их как материалы с контролируемыми свойствами. Таким образом, цель работы заключалась в направленном синтезе сорбентов на основе сверхсшитых со- и терполимеров стирола для аналитических и экологических приложений, исследовании их структуры и сорбционных свойств.

В работе синтезированы высокопористые сверхсшитые сорбенты ($S_{уд}=200-950 \text{ м}^2/\text{г}$) на основе: 1) сополимеров стирола (Ст) и дивинилбензола (ДВБ) (1, 2 и 3 мол. %); 2) терполимеров Ст, ДВБ (2 мол. %) и 4-винилпиридина (4ВП) (5, 12 и 20 мол. %). Подобраны оптимальные условия для процессов полимеризации и сверхсшивки. Для характеристики сорбентов использованы различные физико-химические методы, а именно ИК-спектроскопия, низкотемпературная адсорбция-десорбция азота, оптическая и сканирующая электронная микроскопия.

Для исследования сорбционных свойств СПП в качестве модельных сорбатов были использованы рифампицин и цефуроксим (антибиотики), эритрозин (краситель) и *n*-нитроанилин. Установлено, что наибольшей сорбционной емкостью в отношении рифампицина обладает СПП на основе сополимера Ст с 1 мол. % ДВБ (183 мг/г), в отношении цефуроксима – СПП на основе терполимера, содержащего 5 мол. % 4ВП (163 мг/г). Также показано, что СПП на основе терполимера, содержащего звено 4ВП, сорбирует из водного раствора до 90 % эритрозина ($c_0=0.1 \text{ г/л}$) и *n*-нитроанилина ($c_0=0.3 \text{ г/л}$). При этом, полная десорбция всех сорбатов осуществляется этанолом, что свидетельствует о возможности многократного использования (регенерации) сорбентов данного класса.

Таким образом, полученные результаты демонстрируют возможность направленного создания сорбентов на основе СПП с заданными свойствами потенциально применимых для решения различных аналитических (концентрирование аналитов) и экологических (очистка сточных вод) задач.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» (тема № 1023031700036-2-1.4.4).

1. Davankov V. A., Tsyurupa M. P. Hypercrosslinked polymeric networks and adsorbing materials: synthesis, properties, structure, and applications // Amsterdam: Elsevier. 2011. 648 p.
2. Li B., Gong R., Luo Y., Tan B. Tailoring the pore size of hypercrosslinked polymers // Soft Matter. 2011. V. 7. №. 22. P. 10910-10916.
3. Fontanals N., Marcé R. M., Borrull F., Cormack P. A. G. Hypercrosslinked materials: preparation, characterisation and applications // Polymer Chemistry. 2015. V. 6. №. 41. P. 7231-7244.

Биологически активные наночастицы TiO_2 и $\text{TiO}_2@\text{SiO}_2$: синтез, свойства и применение в сельском хозяйстве***А.С. Коваленко¹, Г.Г. Панова², О.Р. Удалова², Т.В. Хамова¹, А.М. Николаев¹, О.А. Шилова¹***

E-mail: anastasiya.bychk@yandex.ru

¹*Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального Исследовательского Центра «Курчатовский институт» — Институт химии силикатов им. И.В. Гребеницкова, Санкт-Петербург, Россия*²*Федеральное государственное бюджетное научное учреждение "Агрофизический научно-исследовательский институт", Санкт-Петербург, Россия*

Актуальность темы исследования вызвана поиском новых экологически безопасных и высокоэффективных материалов, оказывающих положительное влияние на всхожесть семян и рост растений. В качестве таких материалов могут быть использованы водные суспензии наночастиц TiO_2 , обладающих высокой реакционной способностью, наноразмерностью, электронейтральностью, уникальными фотокаталитическими свойствами, действием при малых количествах.

Ранее нами было установлено положительное влияние водных суспензий TiO_2 на всхожесть семян и ростовые характеристики проростков белокочанной капусты [1]. При этом важно использовать суспензий в оптимальных концентрациях, чтобы не угнетать, а только стимулировать рост и развитие растений [1]. Кроме этого, в ряде случаев полезно пассивировать поверхность TiO_2 функциональной оболочкой, например SiO_2 .

В связи с этим целью данной работы являлось изучение влияния функциональной оболочки SiO_2 на поверхности наночастиц TiO_2 на их биологическую активность в отношении ряда сельскохозяйственных культур (кресс-салата, белокочанной капусты, ярового ячменя).

Наночастицы TiO_2 были синтезированы методом химического осаждения из водного раствора TiCl_4 . Результаты рентгенофазового анализа, малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов и просвечивающей электронной микроскопии показали, что в результате синтеза были получены наночастицы анатаза размером ~ 16 нм.

Модификацию поверхности наночастиц TiO_2 оболочкой SiO_2 проводили посредством золь-гель метода. Формирование частиц $\text{TiO}_2@\text{SiO}_2$ со структурой «ядро-оболочка» было подтверждено методами просвечивающей электронной микроскопии и ИК-спектроскопии [2].

На основе полученных наночастиц TiO_2 и $\text{TiO}_2@\text{SiO}_2$ были приготовлены водные суспензии различных концентраций (0,0001–1 мг/л), которые использовали для предпосевной обработки семян кресс-салата сорта Ажур, белокочанной капусты сорта Ренца де Ровоа и ярового ячменя сорта Ленинградский.

Результаты экспериментов по проращиванию семян, обработанных водными суспензиями исследуемых частиц $\text{TiO}_2@\text{SiO}_2$, в сравнении с использованием аналогичных суспензий частиц TiO_2 без оболочек кремнезема, показали, что в случае кресс-салата и белокочанной капусты формирование структуры $\text{TiO}_2@\text{SiO}_2$ приводит к повышению всхожести семян, длины ростков и длины корней по сравнению с контрольными семенами и семенами, обработанными суспензиями наночастиц TiO_2 без оболочки. Напротив, в случае ячменя формирование оболочки SiO_2 привело к снижению всех показателей по сравнению с использованием TiO_2 без функциональной оболочки. Полученный результат свидетельствует о необходимости индивидуального подхода к каждому виду и даже сорту растений.

1. Khamova T.V. et al. The structure and properties of TiO_2 nanopowders for use in agricultural technologies // Biointerface Research in Applied Chemistry. 2021. V. 11. № 4. P. 12285-12300.
2. Shilova O.A. et al. Surface and photocatalytic properties of sol-gel derived $\text{TiO}_2@\text{SiO}_2$ core-shell nanoparticles // J Sol-Gel Sci Technol. 2023. V. 108. P. 263-273.

Дизайн флуоресцентных зондов для биовизуализации**А.С. Козленко¹, А.Д. Пугачев¹, И.В. Ожогин¹**

E-mail: kozlenko@sfn.edu.ru

¹Научно-исследовательский институт Физической и органической химии Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

Флуоресцентные маркеры и зонды широко используются в биологических исследованиях и медицинской практике. Принципиальное различие между ними состоит в том, что маркеры имеют стабильные спектральные характеристики и применяются для пространственной локализации исследуемых молекул, а зонды способны изменять некоторые параметры излучения в ответ на связывание с целевой молекулой. Таким образом, эти два сходных на первый взгляд типа молекул выполняют различные задачи.

Использование флуоресцентных зондов открывает качественно иные возможности для изучения клеточных процессов, и таким образом диагностики заболеваний на ранних стадиях, либо развития более эффективных методов хирургического вмешательства. Так, хирургия под визуализационным контролем позволяет удалять злокачественных новообразований с максимальной точностью. Несмотря на то, что данная методика уже входит в практику, серьезным ограничением остается небольшая глубина проникновения активирующего излучения (около 100 мкм) при использовании видимого диапазона длин волн. Однако, при использовании излучения ближнего ИК диапазона она может достигать 1-2 см, что существенно увеличивает применимость метода [1]. Потому разработка флуоресцентных маркеров и зондов, функционирующих в ближнем ИК диапазоне, является важным и актуальным направлением исследований. Кроме того, важным аспектом является селективность связывания с определенными типами мишеней, цитотоксичность и стабильность флуорофоров.

В последние годы также заслуженный интерес вызывает концепция тераностики – подхода, объединяющего в себе диагностику и терапию различных заболеваний [2]. В рамках данного подхода используются флуоресцентные зонды, которые вместе с аналитическим сигналом изменяют свою биологическую активность, например, фото- или ацидохромы [3].

Все это свидетельствует об острой необходимости разработки новых флуорофоров, обладающих строго определенными спектральными параметрами и селективностью, что в свою очередь требует рационального подхода к молекулярному дизайну таких соединений. С одной стороны, новые структуры могут быть разработаны на основе совокупности эмпирических данных о молекулярных остовах, обладающих выраженной флуоресценцией, и влиянии различных структурных особенностей и факторов среды на свойства. В то же время современные методы компьютерного моделирования позволяют предсказывать свойства молекулярных систем и дают более глубокое представление о причинах проявления тех или иных характеристик, что также делает их важным инструментом рационального молекулярного дизайна.

В рамках данного доклада подробно рассматриваются основные классы соединений, используемых в качестве флуоресцентных меток, преимущества и недостатки различных подходов к рациональному дизайну флуоресцентных зондов и перспективы развития направления.

1. Nagaya T., Nakamura Y. A., Choyke P. L., Kobayashi H. // *Frontiers in Oncology*. 2017. V. 7. 314.
2. Kelkar S. S., Reineke T. M. // *Bioconjugate Chemistry*. 2011. 22. P. 1879-1903.
3. Meng X., Yang Y., Zhou L., Zhang I., Lv Y., Li S., Wu Y., Zheng M., Li W., Gao G., Deng G., Jiang T., Ni D., Gong P., Cai L. // *Theranostics* 2017. V. 7. No. 7. P. 1781-1794.

Улучшение биосовместимости политетрафторэтилена, модифицированного с использованием плазменных методов***А.Г. Коржова, О.А. Лапуть, И.А. Курзина***

E-mail: korzhova17@gmail.com

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Патологическое отложение кальция на сердечно-сосудистых имплантатах представляет собой опасное явление, способное значительно ухудшить функционирование изделия. Среди причин кальцификации сосудистых имплантатов отмечается воспаление, ремоделирование внеклеточного матрикса, стресс эндоплазматического ретикула в клетках сосудов [1]. Также на кальцификацию имплантатов влияет шероховатость поверхности [2]. К распространенным материалам для сосудистых имплантатов относится политетрафторэтилен (ПТФЭ). Его поверхность имеет определенную степень шероховатости, что способствует осаждению минеральных солей. Актуальным вопросом остается поиск способа поверхностного модифицирования ПТФЭ, приводящего к снижению кальцификации материала. Известно, что воздействие низкотемпературной плазмы на полимер может оказывать различные эффекты, в том числе связанные с изменением структуры поверхности. Однако работ, исследующих влияние плазменного модифицирования на кальцификацию ПТФЭ, на сегодняшний день крайне мало. Таким образом, цель настоящей работы – исследование влияния низкотемпературной азотной плазмы дугового разряда на кальцификацию ПТФЭ *in vivo*.

В работе использовали заплатки для закрытия дефектов кровеносных сосудов из ПТФЭ (АО «НПК «Экофлон», Россия), подвергнутые воздействию азотной плазмы дугового разряда с использованием плазмогенератора «ПИНК» (ИСЭ СО РАН). Анализ шероховатости образцов проводили методом атомно-силовой микроскопии с помощью сканирующего зондового микроскопа NTEGRA Aura (NT-MDT, Россия) в полуконтактном режиме. Исследование кальцификации *in vivo* осуществляли путем подкожной имплантации образцов (0,5×0,5 см) самцам крыс субпопуляции Wistar (90–100 г, n = 5) на 60 суток. Визуализацию кальциевых отложений на гистологических срезах осуществляли с использованием ализаринового красного С. Количественную оценку содержания кальция в эксплантированных образцах определяли с помощью набора Calcium Assay Kit (Abcam, Великобритания).

Согласно полученным результатам, после плазменного модифицирования происходит снижение шероховатости поверхности образцов с 97,8 нм (для исходного ПТФЭ) до 32,0 нм. По данным гистологического анализа, спустя 60 суток после подкожной имплантации крысам исходный ПТФЭ содержал значительное количество кальциевых депозитов в верхнем слое материала, в отличие от модифицированного ПТФЭ, где такие изменения минимальны. Подтверждением стал количественный анализ, выявивший значительно большую склонность исходного ПТФЭ к накоплению кальция – $15,75 \pm 5,23$ мг/г, тогда как показатель модифицированного образца составил всего лишь $0,75 \pm 0,21$ мг/г.

Таким образом, продемонстрирована эффективность применения плазменных методов для модифицирования поверхности сердечно-сосудистых имплантатов. Достигнуто снижение кальцификации материалов в 21 раз при уменьшении шероховатости в 3 раза.

Работа выполнена при поддержке ГЗ Минобрнауки России, проект № FSWM-2025-00, и субсидии № 075-02-2025-1812 от 13.03.2025 Минобрнауки России в рамках федерального проекта «Опережающая подготовка и переподготовка квалифицированных кадров по направлению новых материалов и химии» национального проекта «Новые материалы и химия».

Авторы выражают благодарность сотрудникам лаборатории плазменной эмиссионной электроники ИСЭ СО РАН г. Томск и сотрудникам отдела экспериментальной медицины НИИ КПССЗ г. Кемерово за помощь в получении, анализе и обсуждении результатов.

1. Lejay A., Bratu B., Kuntz S., Neumann N., Heim F., Chakfê N. // EJVES Vascular Forum. 2023. V. 60. P. 1–7.
2. Boloori-Zadeh P., Corbett S.C., Nayeb-Hashemi H. // Materials Science and Engineering C. 2013. V. 33. No. 5. P. 2770–2775.

Электронно-лучевая обработка как метод модификации углеродных волокон из полиакрилонитрила

О.Костерова^{1,2}, Ж.Б. Лютова^{1,2}

E-mail: zhanna.lutova@gmail.com

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

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

Углеродное волокно (УВ) — один из самых востребованных продуктов современной химической промышленности, находящий широкое применение в аэрокосмической, оборонной и автомобильной отраслях [1]. Благодаря сочетанию высокой прочности, низкой плотности и биосовместимости, УВ также применяется для создания имплантов, ортопедических изделий и других медицинских устройств, обеспечивая долговечность и безопасность при медицинских вмешательствах. К числу основных прекурсоров для получения УВ относят волокна вискозы, некоторые смолы, полиимид, полибензотиазол и полиакрилонитрил (ПАН). На сегодняшний день ПАН является наиболее значимым прекурсором и служит основой для 90% всех производимых углеродных волокон.

Установлено, что применение гамма-облучения для модификации ПАН-волокна приводит к увеличению выхода УВ, снижению температуры начала циклизации и, следовательно, позволяет ускорить стадии производства [2]. Электронно-лучевая обработка (ЭЛО) в свою очередь обладает рядом преимуществ, таких как легкая интеграция в производственные линии и высокая управляемость процессом. Цель данной работы — комплексное изучение влияния ЭЛО на химическую структуру, термические и механические характеристики термопластичных ПАН-волокон.

Образцы филамента промышленного ПАН-волокна предоставлены компанией «ЮМАТЕКС» (ГК «Росатом»), облучение дозами от 0,1 до 0,7 МГр проведено компанией «Акцентр Групп» (ГК «Росатом»).

Радиационно-химические преобразования в структуре волокон ПАН исследовались методами химического, термического анализов, УФ- и ИК-спектроскопии, также были проведены механические испытания.

В ходе исследования было выявлено, что электронно-лучевая обработка вызывает структурные преобразования в ПАН-волокнах, что подтверждается трансформацией нитрильных групп ($C\equiv N$) в группы типа $C=N$ и образованию циклических последовательностей с разной длиной сопряжения (ИК- и УФ-спектроскопия). Степень сшивки и степень циклизации показали дозовую зависимость, что свидетельствует об образовании сшитой структуры после облучения. Экспериментально была определена начальная температура циклизации и процент остаточного угля. Модификация методом ЭЛО приводит к улучшению механических характеристик (модуль Юнга, предел прочности), при этом материал после облучения не теряет пластичность.

Данное исследование показывает перспективность электронно-лучевой обработки как эффективного инструмента для модификации структуры, улучшения механических свойств прекурсора, что в итоге приводит к оптимизации технологии производства углеродных волокон с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

1. Peijs T., Kirschbaum R., Lemstra P. J. Chapter 5: A critical review of carbon fiber and related products from an industrial perspective // *Advanced Industrial and Engineering Polymer Research*. 2022. № 2 (5). С. 90–106.
2. Liu W. [и др.]. Radiation-induced crosslinking of polyacrylonitrile fibers and the subsequent regulative effect on the preoxidation process // *Radiation Physics and Chemistry*. 2012. № 6 (81).

Я.Р. Ли^{1,2}, П.В. Карпюк¹, И.Ю. Комендо^{1,2}, М.В. Коржик^{1,3}

E-mail: li_yr@nrcki.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия³Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

Функциональные материалы на основе сложнооксидных соединений со структурой граната, активированные редкоземельными элементами имеют различные области применения. В частности, гранаты, активированные церием, являются преобразователями излучения в люминесцентных источниках освещения и детекторами ионизирующего излучения, работающих по сцинтилляционному принципу регистрации, которые обладают малым временем затухания (10–40 нс), что позволяет с их помощью регистрировать большие потоки частиц и фотонов в медицинской визуализации и досмотровой технике. Особый интерес представляет семейство соединений общего состава $(\text{Gd,Y,Ce,Tb})_3(\text{Al,Ga})_5\text{O}_{12}$, так как данное семейство материалов обладает высоким световыходом, быстрой кинетикой и радиационной стойкостью [1].

Наиболее распространённой формой сцинтилляторов является монокристалл, однако, монокристаллическая форма материалов имеет свои ограничения, как например, невозможность выращивания кристаллов сложного состава. Напротив, керамическая форма даёт больше свободы в варьировании состава и геометрии изделий [2]. Коллоидные методы компактирования вроде шликерного литья [3] и литья на ленту [4] позволяют варьировать форму конечного изделия, однако, в случае шликерного литья возможно загрязнение материала компонентами пористой литевой формы, а при литье на ленту в объёме заготовки остаётся значительное количество высокомолекулярных связующих.

В данной работе рассматривается метод компактирования, схожий с обоими упомянутыми выше коллоидными методами формования, но лишённый их недостатков: литьё ведётся на непористую пластиковую поверхность, а в качестве связующего используется низкомолекулярное органическое соединение. Также благодаря подбору ряда параметров, а именно: атмосфера спекания, предварительная подготовка раствора суспензии, использование разных фракции порошка, а также спекающих добавок, удалось получить конечную керамику с полным оптическим пропусканием порядка 80 %. Благодаря коллоидному методу можно лучше контролировать микроструктуру образца во время спекания — это достигается тем, что при данном методе получается более однородная упаковка частиц порошка в заготовке, если сравнивать его с методом одноосного прессования. Дальнейшая доработка метода может позволить получать планарные керамические в широком диапазоне форм и размеров.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 25-73-30014, <https://rscf.ru/project/25-73-30014>. Аналитические исследования выполнены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ «Курчатовский институт».

1. Cherepy N.J., Kuntz J.D., Seeley Z.M., Fisher S.E., Drury O.B., Sturm B.W., Hurst T.A., Sanner R.D., Roberts J.J., Payne S.A. Transparent ceramic scintillators for spectroscopy and radiography //in Proc. SPIE. Vol. 7805. 2010. pp. 7805–01.
2. Gektin A., Korzhik M. Inorganic scintillators for detector systems. – Springer: Berlin, Germany, 2017.
3. Appiagyei K. A., Messing G. L., Dumm J. Q. Aqueous slip casting of transparent yttrium aluminum garnet (YAG) ceramics //Ceramics International. – 2008. – Т. 34. – №. 5. – С. 1309-1313.
4. Ba X. et al. Comparison of aqueous-and non-aqueous-based tape casting for preparing YAG transparent ceramics //Journal of alloys and compounds. – 2013. – Т. 577. – С. 228-231.

Противоопухолевый потенциал магнитных наночастиц при использовании эффекта гипертермии.

Н.А. Лисаевич, А.С. Дмитриева, В.А. Рыжов, Я.Ю. Марченко

E-mail: lisaevich_na@pnpi.nrcki.ru

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

Разработка систем для магнитной гипертермии на основе наночастиц оксида железа является одним из наиболее перспективных направлений современной наномедицины. Переменные магнитные поля позволяют осуществлять локальный контролируемый нагрев наночастиц, что делает возможным их использование в терапии злокачественных новообразований. Особенно примечателен факт клинического применения данного метода при лечении рака предстательной железы в рамках монотерапии [1], где были достигнуты устойчивые терапевтические результаты при воздействии магнитного поля интенсивностью 4–5 кА/м и частотой 100 кГц — это первый и пока единственный подтверждённый пример успешного использования магнитной гипертермии наночастиц у пациентов.

Магнитная гипертермия основана на избирательном нагреве опухолевых клеток за счёт тепловыделения магнитных наночастиц под действием переменного магнитного поля. При помещении наночастиц в клеточную среду и воздействии полей с амплитудой порядка нескольких кА/м и частотой сотен кГц энергия магнитных колебаний преобразуется в тепловую, вызывая локальное повышение температуры до 42–55 °С, при котором злокачественные клетки подвергаются апоптозу или некрозу, тогда как здоровые ткани остаются интактными. Исследования *in vitro* позволяют моделировать эти процессы в контролируемых условиях, оценивая эффективность нагрева, стабильность и биосовместимость наночастиц.

Целью настоящей работы являлась разработка установки, способной генерировать магнитные поля, близкие к клиническим параметрам (до 5 мТл, 100 кГц), и экспериментальное исследование нагрева коллоидных систем на основе наночастиц Fe₃O₄. Для этого был собран параллельный LC-контур, обеспечивающий резонансную частоту 100–900 кГц. На первом этапе использовался генератор ГЗ-112/1 с усилителем, позволивший произвести настройку контура и согласование с нагрузкой. Катушка индуктивности из медной трубки снабжена водяным охлаждением, предотвращающим перегрев при длительных испытаниях.

Наночастицы оксида железа синтезированы методом соосаждения солей Fe(III) и Fe(II) в щелочной среде с последующей стабилизацией декстраном (9–11 кДа). Концентрация железа в образце составила $2,0 \cdot 10^4$ мкг/мл. Эксперименты по индукционному нагреву показали устойчивое повышение температуры образца, помещённого в катушку: при 323 кГц разница температур между испытуемым и контрольным образцами достигала 4,0 °С через 40 минут. Это указывает на эффективное поглощение энергии переменного магнитного поля и подтверждает возможность использования разработанной установки для моделирования процессов магнитной гипертермии *in vitro* в условиях, близких к клиническим.

Таким образом, созданная экспериментальная система способна воспроизводить параметры магнитных полей, применявшихся в клинических испытаниях [1], и может служить модельной платформой для дальнейших исследований противоопухолевого потенциала магнитных наночастиц.

1. Johannsen M., Gneveckow U., Taymoorian K., Thiesen B., Waldoefner N., Scholz R., Jung K., Jordan A., Wust P. Clinical hyperthermia of prostate cancer using magnetic nanoparticles: Presentation of a new interstitial technique // International Journal of Hyperthermia. — 2005. — Vol. 21, No. 7. — P. 637–647. — DOI: 10.1080/02656730500158325.

Д.С. Лисанов¹, Т.Л. Тураева¹, Е.К. Белоногов^{1,2}

E-mail: lisanovbtf211@gmail.com

¹Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

²Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Аморфные и нанокристаллические плёнки системы Li-Nb-O представляют значительный интерес для современной функциональной микро- и оптоэлектроники. Благодаря уникальным сегнетоэлектрическим, пьезоэлектрическим, нелинейно-оптическим и фоторефрактивным свойствам, они являются перспективным материалом для создания интегрально-оптических схем, волноводов [1]. Ключевым преимуществом аморфных пленок является возможность их осаждения на различные типы подложек, включая кремний, что обеспечивает хорошую интеграцию с существующей полупроводниковой технологией [2]. Процесс контролируемой кристаллизации аморфной матрицы является основным методом формирования нанокристаллических или поликристаллических структур с заданными размерами зёрен и текстурой.

Несмотря на обширные исследования свойств тонкопленочного ниобата лития, вопросы, связанные с кинетикой первичной кристаллизации аморфных пленок системы Li-Nb-O, остаются недостаточно изученными. Определение эффективной энергии активации кристаллизации, частотного фактора и параметра Аврами является критически важным для прогнозирования термической стабильности аморфной фазы, оптимизации режимов отжига и целенаправленного управления микроструктурой формируемой плёнки [3].

Цель работы - выявление закономерностей синтеза стехиометрических плёнок LiNbO₃ (дискретных, сплошных) при конденсации в вакууме методами ВЧМР и ИЛР смеси оксидов системы Li-Nb-O.

Плёнки наносили в процессе высокочастотного магнетронного распыления (ВЧМР) или ионно-лучевого распыления (ИЛР) мишени стехиометрического состава LiNbO₃ на поверхности нагреваемых/ненагреваемых подложек. В качестве подложек использовали монокристаллические пластины кремния (111) и (100) n-типа, а также окисленные кремниевые пластины с SiO₂ на поверхности. Процесс напыления пленок проводили на неподвижные или вращающиеся подложки. Параметры ВЧМР: рабочая среда Ar/O₂, удельная мощность 15 Вт/см². Параметры ИЛР: рабочая среда Ar/O₂, ускоряющее напряжение 2,1 кВ, ток ионного луча 0,1 А с компенсацией заряда на мишени. Полученные пленки исследовали методами дифракции быстрых электронов (ЭГ-100М, ПРЭМ-200), рентгеновской дифрактометрии (ARL X'TRA Thermo Techno) и сканирующей зондовой микроскопии (Solver P47 и система NTEGRA «НТ-МДТ»).

Установлено:

1. Аморфные и кристаллические плёнки системы Li-Nb-O, созданные в процессе ИЛР, имеют бóльшую шероховатость по сравнению с плёнками, нанесёнными методом ВЧМР. Вращение подложек в процессе нанесения плёнок снижает перепад высот, уменьшает шероховатость.

2. Дисперсность и шероховатость плёнок, осаждённых на подогреваемую подложку всегда выше, чем у плёнок, осаждённых без предварительного нагрева.

3. На монокристаллических пластинах Si(111) n-типа реализуется наибольшая шероховатость плёнок системы Li-Nb-O, как при ИЛР, так и при ВЧМР методах нанесения.

1. Boes A. et. al. Lithium niobate photonics: Unlocking the electromagnetic spectrum // *Science*. 2023. V. 379. N 6627. P. 4396 – 4399.
2. Rabiei P. et.al. Heterogeneous lithium niobate photonics on silicon substrates // *Optics Express*. 2013. V. 21. N 21. P. 25573-25581.
3. Akazawa H. et. al. Precipitation kinetics of LiNbO₃ and LiNb₃O₈ crystalline phases in thermally annealed amorphous LiNbO₃ thin films // *Physica status solidi (a)*. 2006. V. 203, N 11. P/ 2823-2827.

Прочностные характеристики кварцоидных стекол, допированных цезием***Я.П. Лушанкин, Т.А. Цыганова, И.Н. Анфимова, Л.Н. Куриленко***

E-mail: lushankin2201@gmail.com

Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт химии силикатов им. И.В. Гребенищикова (филиал НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ – ИХС)

Разработка и применение новых цезийсодержащих кварцоидных стекол (КС) является перспективным направлением в различных областях промышленности. Так, стекла с содержанием изотопа Cs^{137} могут использоваться в сельском хозяйстве для обработки семян, овощей, воды. Также Cs^{137} является коммерчески полезным радиоактивным изотопом, который используется в медицинских установках при облучении крови и лечение рака. Кроме того, цезийсодержащие КС играют важную роль при создании различных приборов (например, оптический биопинцет), которые необходимы для манипуляций с клетками микроорганизмов, с соблюдением абсолютной стерильности (отсутствие посторонних патогенов). Известны работы, связанные с применением цезийсодержащих стекол в разработке сцинтилляторов, которые излучают свет при поглощении ионизирующего излучения. Также цезийсодержащие КС могут находить применение как модельные стекла в качестве контейнеров для захоронения жидких радиоактивных отходов.

В работе было изучено влияние условий синтеза высококремнеземных кварцоидных стекол на их микротвердость и трещиностойкость. КС были синтезированы на основе пористых стекол (ПС) (состав по анализу, мас. %: $0.17 \text{ Na}_2\text{O} \cdot 5.96 \text{ B}_2\text{O}_3 \cdot 93.75 \text{ SiO}_2 \cdot 0.07 \text{ P}_2\text{O}_5 \cdot 0.05\text{F}$) [1], которые были подвергнуты импрегнированию водными растворами CsNO_3 (0,3 – 0,6 моль/л) с последующим спеканием при температурах до 900°C до схлопывания пор.

Исследование морфологии КС проводилось с помощью методов СЭМ и ПЭМ. По данным СЭМ пористость у КС (с пропиткой CsNO_3) и у КС (без пропитки) не наблюдается. По данным ПЭМ для синтезированных образцов КС было отмечено отсутствие кристаллических фаз. Микротвердость по методу Виккерса измерялась с использованием твердомера Microhardness Tester HV-1000 (нагрузка 0.3 кгс и 0.5 кгс, время 15 с) [2]. При расчете и трещиностойкости стекол K_1C использовались данные микротвердости и измерения модуля Юнга [3]. Результаты исследований показали, что с введением Cs в состав КС наблюдается уменьшение микротвердости (КС без цезия: $\text{HV}_{0.5} 7,02$ ГПа; КС с цезием: $\text{HV}_{0.5} 4,1$ ГПа) и незначительное увеличение способности материала противостоять образованию трещин. С ростом содержания цезия в стекле в пределах изученных концентраций (Cs_2O , мас. %: 0,76 - 2,11) величина трещиностойкости K_1C растет в пределах (0,075 - 0,118 кгс/мм^{3/2}). При этом зависимости величины микротвердости и трещиностойкости K_1C от содержания Cs_2O в КС имеют осциллирующий (колебательный) характер. Можно предположить, что модификация КС ионами цезия приводит к некоторому локальному изменению структуры стекла, связанному с образованием боратных тетраэдров $[\text{BO}_4]$ и деполимеризацией каркаса $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$, которое отразилось на исследованных прочностных характеристиках КС с изменением характера образования трещин в местах нахождения групп $\text{Cs}[\text{BO}_4]$ [4].

Работа выполнена в рамках Государственного задания Филиала НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ – ИХС (Государственная регистрация 1023032900385-8-1.4.3).

1. Антропова, Т.В., Калинина, С.В., Костырева, Т.Г., Дроздова, И.А., Анфимова, И.Н. // Физика и химия стекла. 2015. Т. 41. № 1. С. 25–41.
2. ГОСТ 9450-76. Измерение микротвердости вдавливанием алмазных наконечников. М.: Издательство стандартов, 1977
3. Крень А.П. // Проблемы прочности, 2009, №6, С. 51-61.
4. Жданов С.П., Коромальди Е.В. // Изв. АН СССР., Отд. хим. наук., 1959, N 4, С. 626-636.

Синтез и исследование электронной структуры систем на основе графена, магнитных и тяжелых металлов на подложке SiC

П.Д. Лыжова, А.А. Рыбкина, А.Г. Рыбкин, А.В. Тарасов, А.М. Шикин

E-mail: polina.lyzhova@yandex.ru

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

Исследования контакта графена с тяжелыми и магнитными металлами привлекают повышенный интерес в последние годы вследствие уникальных свойств графена, обусловленных линейностью дисперсионной зависимости электронных состояний вблизи уровня Ферми - конус Дирака, и возможностью его использования в качестве элемента нанoeлектроники и спинтроники. Управление спин-орбитальным взаимодействием в графене может осуществляться с помощью интеркаляции атомов тяжелых и магнитных металлов под монослой графена. Исследования показывают, что интеркаляция атомов металлов (например, золота) позволяет достичь величины спинового расщепления электронных состояний порядка 100 мэВ [1, 2]. Эта величина зависит от подложки и количества интеркалированного Au. Кроме того, создание контакта графена с атомами Au и с магнитными атомами, например Co, позволяет обнаружить эффект ферримагнитного упорядочения атомов графена [3]. При этом использование монокристаллических подложек является необходимым для формирования эпитаксиального графена и наблюдения в нем квантово-размерных эффектов. И одним из методов получения эпитаксиального слоя графена с целью применения в спинтронике является термическая графитизация, заключающаяся в отжиге пластин SiC при температурах выше 1150 °C [4].

В рамках работы был синтезирован графен на подложке 6H-SiC(0001) с интеркалированными атомами Co и Au и проведены экспериментальные и теоретические исследования его электронной структуры. Использовались следующие методы исследования: фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, дифракция медленных электронов и теоретические расчеты зонной структуры методом теории функционала плотности. В результате последовательной интеркаляции атомов Au и Co было показано, что в электронной структуре формируется конус Дирака электронных состояний, характерный для квазисвободного графена. Теоретические расчёты позволили рассчитать зонную структуру модельных ячеек систем Графен/Au/SiC и Графен/Pt/SiC (в качестве сравнения с другим тяжелым металлом) с оценкой величины спин-орбитального взаимодействия электронных состояний графена в области конуса Дирака. Так, расчеты продемонстрировали, что для контакта графена с монослоем Pt характерна более высокая величина спин-орбитального расщепления, чем для системы с Au, а в системе Графен/Au/Co/SiC удалось достичь хорошего согласия теоретических и экспериментальных данных электронной структуры и выявить расщепление по спину электронных состояний в области конуса Дирака, которое может быть обусловлено как индуцированным спин-орбитальным взаимодействием, так и обменным взаимодействием ввиду эффекта близости с Co. Полученные результаты открывают перспективы создания устройств спинтроники на основе магнитно-спин-орбитального графена, выращенного на полупроводниковой подложке.

1. D. Marchenko, A. Varykhalov, M. Scholz, G. Bihlmayer, и O. Gumenyukh, «Giant Rashba splitting in graphene due to hybridization with gold», Nature Communications, т. 3, ноя. 2012
2. A. Shikin, A. Rybkin, D. Marchenko, A. Rybkina, M. Scholz, «Induced spin-orbit splitting in graphene: the role of the intercalated metal and π -hybridization», New Journal Physics, 2013
3. A. G. Rybkin и др., «Sublattice Ferrimagnetism in Quasifreestanding Graphene», Phys. Rev. Lett., т. 129, вып. 22, с. 226401, ноя. 2022
4. C. Riedl, A. A. Zakharov, и U. Starke, «Precise in situ thickness analysis of epitaxial graphene layers on SiC(0001) using low-energy electron diffraction and angle resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy», Applied Physics Letters, т. 93, вып. 3, с. 033106, июл. 2008

Сравнительное исследование систем вида XBi_2Te_4 ($\text{X} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$)

Р.В.Макеев¹, А.В.Ерыженков¹, А.В.Тарасов^{1,2}, А.М.Шикин¹

E-mail: radomir.makeev@spbu.ru

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

²Московский Физико-Технический Институт, Москва, Россия

Топологические изоляторы (ТИ) – это материалы, которые обладают ненулевой объемной запрещенной зоной и проводящей поверхностью, проводимость которой обеспечивается топологическими поверхностными состояниями (ТПС)¹. Включение магнитных атомов в ТИ позволяет открыть запрещенную зону в ТПС². Целью данного исследования было провести сравнительное исследование систем вида XBi_2Te_4 (где $\text{X} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$), а также изучить влияние изменения типа магнитного атома на электронную и топологическую структуру исследуемых систем. Эти материалы являются перспективной платформой для реализации квантового аномального эффекта Холла⁴. Также они могут быть использованы для создания устойчивых кубитов с использованием фермионов Майорана.

Все расчеты были выполнены с помощью теории функционала плотности (ТФП) с использованием программного пакета OpenMX³. Исследуемые структуры были получены из ячейки MnBi_2Te_4 замещением атомов Mn на атомы других 3d – металлов. Все системы исследовались в антиферромагнитной конфигурации магнитных моментов.

В ходе работы были проанализированы зонные структуры всех систем. Также были построены локализации ТПС и установлена зависимость между величиной энергетической запрещенной зоны и “намагниченностью” ТПС. “Намагниченность” определялась как сумма магнитных моментов атомов, умноженных на их весовую функцию. Такая “намагниченность” ТПС учитывает не только вклад атомов магнитных металлов, но и их вес в конкретном ТПС.

В ходе анализа объемных зонных структур было выяснено, что системы с Sc, Ti, V, Mn, Fe, Co являются ТИ и у них образуются ТПС внутри объемной запрещенной зоны в точке Γ зоны Бриллюэна. Наибольшая ширина запрещенной зоны наблюдается для систем с Mn, Fe и Co. Это может быть связано с большей, относительно других d-металлов, величиной магнитного момента магнитного атома. Также это может быть вызвано тем, что для систем с Mn, Fe и Co наблюдаются наибольшие величины локализации ТПС на магнитном атоме. Для всех систем пик локализации ТПС наблюдается на ВдВ-промежутке между первым и вторым поверхностными семислойными блоками. Была обнаружена линейная зависимость между величиной энергетической запрещенной зоны в ТПС и их намагниченностью. Также, в ходе релаксации систем было выяснено, что тип материала, кроме CuBi_2Te_4 , сохраняется, CuBi_2Te_4 становится ТИ. После релаксации направления и величина магнитных моментов магнитных атомов, в сравнении с нерелаксированными системами не изменились. Сильно изменилась величина запрещенной зоны в ТПС.

Авторы выражают благодарность СПбГУ за предоставление исследовательского проекта 125022702939-2

1. K.Mazumder, A brief review of Bi_2Se_3 based topological insulator: From fundamentals to applications // Journal of Alloys and Compounds, 888 (2021)
2. M. M. Otrokov, Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // Nature, 576.7787 (2019)
3. T. Ozaki, Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures // Phys. Rev. B. 67, 155108 (2003)
4. Y. Deng, Quantum anomalous Hall effect in intrinsic magnetic topological insulator MnBi_2Te_4 // Science Volume 367, 6480 (2020)

Нестерова Е.Д., Бобкова Т.И.

E-mail: ned-prom@mail.ru

Федеральное государственное унитарное предприятие «Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» имени И.В. Горынина Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

В современном машиностроении и судостроении существует проблема повышенного износа поверхностей деталей, что влечет за собой полную замену комплектующих или восстановительного ремонта поверхности изделий. Начиная с прошлого века для защиты поверхности деталей и продления их срока службы стали наносить покрытия, обладающие лучшими эксплуатационными характеристиками. Это позволяет использовать более дешевые марки основного материала, что не приводит к удорожанию стоимости всего производственного цикла изготовления деталей. Однако, освоение новых областей промышленности и рост эксплуатационных требований делает актуальным изучение новых классов материалов. Одним из таких классов являются высокоэнтропийные сплавы (ВЭС), основная особенность которых заключается в образовании твердых растворов замещения с 5тью и более компонентами. Ещё одной ключевой особенностью ВЭС является «коктейльный эффект», характеризующийся невозможностью суммирования свойств от всех компонент системы, то есть появление эмерджентных свойств. На практике для эквивалентной ВЭС системы AlNiCoFeCr характерны такие свойства, как низкотемпературная пластичность, стойкость к окислению до температур 1100 °С и коррозионная стойкость наравне с нержавеющей сталью. Однако покрытия AlNiCoFeCr обладают низкими значениями микротвердости порядка 2 ГПа [1]. В работе [2] легирование сферического порошка системы AlNiCoFeCr частицами TiB₂ (30 % масс.) позволило повысить микротвердость в покрытиях, нанесенных методом холодного газодинамического напыления, до 7 ГПа.

В представленной работе используется синтезированный на чашечном истрителе ИВЧ-3 композиционный порошок с добавлением наноразмерных порошков TiB₂ и TiCN, в количестве 10 % масс. и 23 % масс., соответственно.

При микроплазменном напылении покрытий не происходит фазообразования и керамические компоненты распределяются по поперечному сечению в виде слоистых образований. При отработке режимов напыления достигнуты показатели пористости менее 1 %.

В результате добавления наноразмерных частиц диборида титана и карбонитрида титана повышена микротвердость ВЭС-покрытий на основе системы AlNiCoFeCr со значений интегральной микротвердости от 2 ГПа до 9,1 и 8,1 ГПа, соответственно, без существенного снижения модуля упругости с 150 ГПа до 125 и 130 ГПа, соответственно.

1. Li X., Feng Y., Liu B., Yi D., Yang X., Zhang W., Chen G., Liu Y., Bai P. Influence of NbC particles on microstructure and mechanical properties of AlCoCrFeNi high entropy alloy coatings prepared by laser cladding // J. Alloys Compd. – 2019. – Vol. 788. – P. 485–494. <https://doi.org/10.1016/J.JALLCOM.2019.02.223>.
2. Nakonechnyi S., Soloviova T., Yurkova A., Solodkiy I., Loboda P. Cold sprayed AlNiCoFeCr–TiB₂ metal matrix composite coatings // Vacuum. – 2023. – Vol. 213. – Article 112144. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2023.112144>.

Протеинат серебра «Протаргол» - источник модельных наночастиц серебра

**И.С. Новиков^{1,2}, А.А. Анциферова^{1,2}, Т.Д. Пацаев¹, С.В. Алёшин¹, О.А. Кондратьев¹,
С.И. Викторov^{1,2}, А.В. Моисеенко³, П.К. Кашкаров^{1,2,3}**

E-mail: novikov.is@phystech.edu

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

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

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

Протеинат серебра («Протаргол»), впервые синтезированный в 1897 году [1], в настоящее время применяют в клинической медицине для лечения инфекционных заболеваний [2]. В России производством «Протаргола» занимается ряд коммерческих компаний, использующих различные технологии синтеза, что может приводить к существенным отличиям характеристик таких препаратов, вплоть до варьирования формы серебра в растворах [3]. Большинство производителей в инструкции к таким препаратам ограничивается указанием лишь на «протеинат серебра» без детализации характеристик действующего вещества.

В данной работе изучили физические и геометрические свойства четырёх различных коммерческих образцов «Протаргола» с применением комплекса невысокодоступных современных аналитических методов. Для анализа морфологии и распределения по размерам частиц в образцах использовали растровую электронную микроскопию, просвечивающую электронную микроскопию, а также криогенную просвечивающую электронную микроскопию для визуализации нативного состояния частиц в растворе. Химический состав образцов определили с помощью энергодисперсионного микроанализа, а кристаллическую структуру частиц исследовали методом рентгеновской дифрактометрии. Оптические свойства и стабильность коллоидных растворов изучали методами спектрофотометрии и динамического рассеяния света. Состав и природу стабилизирующего белкового компонента установили с помощью метода высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием.

Результаты исследования демонстрируют различия в ключевых физико-химических свойствах образцов разных производителей. Установили наличие наноформы серебра в их составе. Основные отличия выявили в характере распределения частиц по размерам, скорости агрегации и кристаллической структуре наночастиц серебра. Показали, что «Протаргол» может служить финансово и коммерчески доступным источником модельных наночастиц серебра для научных исследований. Соответствие масштаба размеров частиц нанодиапазону позволяет предположить новые области применения «Протаргола». Например, некоторые возможные области использования наночастиц серебра, стабилизированных белками, перечислены в обзоре [4].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 24-19-00792).

1. Elisabeth Vaupel. Arthur Eichengr n—Tribute to a Forgotten Chemist, Entrepreneur, and German Jew // Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim Angew. Chem. Int. Ed. —2005, 44, 3344–3355
2. Бойкова Н.Э. К вопросу о роли коллоидного серебра в лечении патологии верхних дыхательных путей и уха // Медицинский совет. — 2017. — № 9. — С. 56–59.
3. Бурмистров В.А., Зайковский В.И., Бурмистров А.В., Рачковская Л.Н., Шурлыгина А.В., Попова Т.В., Робинсон М.В., Королев М.А., Летагин А.Ю. Сравнительное электронно-микроскопическое и микробиологическое исследование препаратов протеината серебра // Сибирский научный медицинский журнал. 2018. Т. 38, № 4. С. 30–36.
4. Hasan S.M., Hussain S., Yousuf M., Tapia-Hernández J.A., Raja D.A. // International Journal of Biomaterials. 2025. V. 2025. P. 1-37

Роль структурных дефектов в фотокатализе: сравнение лазерно-синтезированных наночастиц ниобата лития и пентаоксида ниобия

Б.Е.Позов, Д.И.Целиков, И.А.Завидовский, И.В.Мартынов, А.В.Сюй

E-mail: pozov.be@phystech.edu

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

Наноразмерные материалы представляют значительный научный и практический интерес благодаря уникальным оптическим и физико-химическим свойствам, существенно отличающимся от свойств объёмных аналогов. Их применение охватывает широкий спектр направлений: от адресной доставки лекарственных препаратов до очистки окружающей среды. Существующие коллоидно-химические методы синтеза имеют существенные ограничения, связанные с использованием токсичных прекурсоров и сложностью контроля морфологии частиц [1—3].

Жидкофазная лазерная абляция (LAL) представляет собой перспективную альтернативу традиционным методам синтеза [1—3]. В рамках исследования разработан метод получения наночастиц ниобата лития (LiNbO_3) и пентаоксида ниобия (Nb_2O_5) посредством фемтосекундной лазерной фрагментации частиц микроразмерных порошков в коллоиде.

Синтезированные золи продемонстрировали высокую устойчивость к агрегации ($|\zeta\text{-потенциал}| > 30$ мВ) и сфероидальную морфологию наночастиц со средним диаметром 44 нм для LiNbO_3 и 69 нм для Nb_2O_5 . Уникальные оптические свойства материалов проявляются в широком поглощении в видимом и ультрафиолетовом диапазонах. Структурные исследования выявили поликристаллическую природу LiNbO_3 и аморфную структуру Nb_2O_5 .

Фотокаталитическая активность наночастиц была изучена в реакции фоторазложения органического загрязнителя — метиленового синего. Наночастицы LiNbO_3 показали вдвое более высокую эффективность по сравнению с Nb_2O_5 благодаря дефектным состояниям в запрещённой зоне, способствующим генерации и разделению электронно-дырочных пар.

Таким образом, метод LAL позволяет получать наночастицы LiNbO_3 с высокой фотокаталитической активностью в видимом диапазоне, а кристаллическая структура материала выступает ключевым фактором, определяющим его каталитические свойства.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 25-79-10108

1. Ushkov A.A. et al. Tungsten Diselenide Nanoparticles Produced via Femtosecond Ablation for SERS and Theranostics Applications // *Nanomaterials*. 2024. V. 15. No. 1. P. 4.
2. Zavidovskiy I.A. et al. Leveraging Femtosecond Laser Ablation for Tunable Near-Infrared Optical Properties in MoS_2 -Gold Nanocomposites // *Nanomaterials*. 2024. V. 14. No. 23. P. 1961.
3. Syuy A.V. et al. Laser-synthesized TiN-based nanoparticles as novel efficient electrostatic nanosorbent for environmental water cleaning // *Physica Scripta*. 2024. V. 99. No. 11. P. 115914.

Исследование влияния наноразмерных присадок на свойства композитных материалов на основе поли-(L-лактида)

А.В. Попугаев^{1,2}, Ж.Б. Лютова^{1,2}

E-mail: zhanna.lutova@gmail.com

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

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

Полимолочная кислота (ПМК) — это один из наиболее активно изучаемых биоразлагаемых полимеров, представляющий большой интерес для применения в области челюстно-лицевой хирургии и реконструктивной стоматологии благодаря своей биосовместимости [1]. Её преимущества включают биологическую совместимость, способность к остеоинтеграции и возможность изготовления индивидуальных имплантов с использованием аддитивных технологий за относительно невысокую стоимость. Однако, широкое применение ПМК ограничивается её недостатками, такими как: длительный срок биодеградации, возможность возникновения воспалительных реакций в процессе биодеградации и низкие механические характеристики.

Возможным вариантом снижения рисков возникновения воспалительных реакций является добавление присадок, имеющих антиоксидантные свойства, таких как: фуллерен [2], графен [3] и галлуазитовые наносвитки, а методом влияния на скорость биодеградации – обработка ионизирующим излучением (ИИ).

В рамках данного исследования были изготовлены филаменты на основе ПМК с указанными присадками. Методом послойного наплавления нитей были получены образцы, в последствие подвергшиеся облучению электронным пучком в диапазоне поглощённых доз от 0 до 150 кГр с шагом в 25 кГр.

Исследование влияния ИИ на скорость биодеградации проводилось согласно ГОСТ Р ИСО 13781—2011 [4], изучение влияния ИИ на механические характеристики образцов проводилось согласно ГОСТ Р ИСО 11262–80 [5].

Авторы выражают благодарность сотрудникам кафедры Оборудования и робототехники переработки пластмасс СПбГТИ(ТУ) за помощь, оказанную при изготовлении филаментов и сотрудникам инжинирингового центра СПбГТИ(ТУ) за помощь, оказанную при проведении механических испытаний образцов.

1. James M. Anderson, Matthew S. Shive Biodegradation and biocompatibility of PLA and PLGA microspheres// Advanced Drug Delivery Reviews. - 2012. – Т. 64. – С. 72-82.
2. Zeinalov E. B., Koßmehl G. Fullerene C60 as an antioxidant for polymers // Polymer Degradation and Stability. 2001. Vol. 71. No. 2. pp. 197-202.
3. Qiu Y. et al. Antioxidant chemistry of graphene-based materials and its role in oxidation protection technology. // Nanoscale. 2014. Vol. 6. No. 20. pp. 11744-11755.
4. ГОСТ Р ИСО 13781—2011. Национальный стандарт Российской Федерации. «Смолы и отформованные элементы на основе поли(L-лактида) для хирургических имплантатов. Исследование деградации in vitro» (утв. и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 15 июня 2011 г. № 121-ст.
5. ГОСТ Р ИСО 11262–80 «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» (утв. и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 2 февраля 2018 г. № 45-ст).

Получение многокомпонентных удобрений на основе цинка с помощью технологии сокристаллизации

П.Р. Сайфулина, Н.А. Васильев

E-mail: polinasaif@gmail.com

Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Разработка новых форм минеральных удобрений является актуальной задачей при растущих потребностях в их эффективности. Новые методики разработки агрохимикатов обоснованы принципами рационального дизайна материалов, одним из которых является технология сокристаллизации. Такой метод позволяет получать новые кристаллические материалы за счет объединения нескольких молекулярных или ионных соединений в определенном стехиометрическом соотношении. Это открывает возможности для разработки инновационных удобрений с повышенными качественными характеристиками [1].

Цинк является одним из важнейших микроэлементов сельского хозяйства, участвующим в ключевых биохимических процессах растений. Однако дефицит цинка в почвах является широко распространенной проблемой, а традиционные удобрения на его основе обладают низкой биодоступностью [2]. Таким образом, необходима разработка новых форм цинксодержащих агрохимикатов.

Целью этого исследования является получение многокомпонентного кристалла на основе цинка, который может использоваться в качестве удобрения.

Для решения задачи был выполнен теоретический скрининг подходящих коформеров и подбор растворителя. В качестве оптимальных соединений были выбраны глицин и лимонная кислота. Сокристаллизация проводилась методом испарения растворителя. Полученное вещество было охарактеризовано при помощи порошковой рентгеновской дифракции, дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и инфракрасной спектроскопии (ИК). Комплексный анализ подтвердил образование новой кристаллической фазы, что указывает на возможность использовать технологию сокристаллизации для разработки эффективных многокомпонентных удобрений.

1. Ammar M. et al. Sustainable by (crystal) design: novel materials for agriculture via active ingredient cocrystallization //RSC Sustainability. – 2025.
2. Alloway B. J. Zinc in soils and crop nutrition. – 2008.

Экситонные дифракционные оптические элементы на основе галогенидных перовскитов

А.Ю. Самсонова, Е.А. Башегурова, Е.И. Дерибина, Р.С. Назаров, М.С. Ложкин, Ю.В. Капитонов

E-mail: a.y.samsonova@spbu.ru

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

Галогенидные перовскиты — это полупроводники, недавно привлёкшие внимание исследователей благодаря дешёвому синтезу, устойчивости к дефектам, потенциальной технологичности при создании устройств оптоэлектроники. Оптические свойства этих материалов определяются экситонами — водородоподобным связанным состоянием электронов и дырок.

Экситоны в полупроводниках способны эффективно взаимодействовать со светом, обладают нелинейно-оптическими свойствами и чувствительны к внешним воздействиям. Перечисленные свойства делают возможным создание экситонных дифракционных оптических элементов (ДОЭ), концепция которых была впервые предложена в работе [1]. В экситонных ДОЭ осуществляется модуляция резонансного отклика экситонов, что приводит к возможности управления светом за счёт превращения плоского волнового фронта в пространственно-модулированный фазовый фронт на резонансной энергии. Таким образом, главное отличие экситонных ДОЭ от традиционных состоит в том, что дифракция на таких элементах происходит только вблизи частоты экситонного резонанса, а вне резонанса элемент является «прозрачным».

Для создания экситонных ДОЭ на основе галогенидных перовскитов было предложено два метода: облучение материалов сфокусированным ионным [2] и электронным пучками. При таком облучении вводятся дополнительные дефекты без изменения рельефа поверхности, что позволяет осуществлять модуляцию неоднородного уширения экситонного резонанса. В работе [2] продемонстрирован резонансный характер дифракции и ее перестройка с помощью температуры для экситонного ДОЭ на основе галогенидного перовскита CsPbBr_3 , полученного при облучении ионным пучком. В последних исследованиях продемонстрирован резонансный характер дифракции и его модификация с помощью изменения температуры для созданного путем облучения электронами ДОЭ на основе другого представителя семейства галогенидных перовскитов: тонкой поликристаллической пленки MAPbI_3 .

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда и Санкт-Петербургского научного фонда № 25-12-20007.

Авторы выражают благодарность ресурсным центрам СПбГУ «Нанопотоника», «Рентгенодифракционные методы исследования» и лаборатории «Фотоактивные нанокompозитные материалы», на оборудовании которых было выполнено данное исследование, а также Университету ИТМО и лаборатории Кристаллофоники СПбГУ за предоставленные образцы.

1. Kapitonov Yu.V. et al. Spectrally selective diffractive optical elements based on 2D-exciton resonance in InGaAs/GaAs single quantum wells // *Phys. Status Solidi B*. 2013. V. 250. No. 10. P. 2180-2184.
2. Mamaeva M.P. et al. Halide Perovskite Excitonic Diffraction Grating // *Adv Opt Mater*. 2023. V. 11. No. 5. P. 2202152.

Повышение точности и разрешения 3D-печати керамикой методом стереолитографии

А.М. Сергеев^{1,2}, Л.В. Ермакова¹, П.С. Соколов¹

E-mail: Sergeev_AM@nrcki.ru

¹ФГБУ “Национальный Исследовательский Центр “Курчатовский институт””, Москва, Российская Федерация

²ФГБУ ВО “Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева”, Москва, Российская Федерация

Сложные оксиды с разупорядоченной структурой граната состава $(\text{Gd}, \text{Y})_3(\text{Al}, \text{Ga})_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$ (GYAGG:Ce) обладают выдающимися сцинтилляционными и люминесцентными свойствами [1]. Их перспективно получать в форме керамики благодаря возможности варьирования состава и скорости процесса, а в совокупности с аддитивными технологиями возможно формировать объекты сложной геометрической формы. Стереолитография по сравнению с другими широко распространёнными технологиями трёхмерной (3D) печати характеризуется высоким разрешением. Одной из её разновидностей является цифровая обработка светом (DLP), в которой послойная фотополимеризация мономеров реализуется с помощью ультрафиолетового (УФ) проектора. Характерное для DLP-печати разрешение - 200-250 мкм [2]. Это несколько проигрывает лазерной стереолитографии, но ускоряет процесс формирования изделий. Кроме того, методы фотополимеризации в ванне демонстрируют анизотропию усадки, зависящую от направления печати. С целью улучшения разрешения - совпадения реальных размеров изделий заданным и соответствие правильности их формы - можно изменить параметры печати и подобрать коэффициент компенсации неравномерной усадки [3].

В настоящей работе проведены серии экспериментов по подбору параметров печати - толщины слоя и времени засветки - для DLP-печати трехмерных моделей пластин 4,5x4,5x0,3 мм с различным диаметром отверстий 180, 240 и 300 мкм. Затем рассчитан коэффициент компенсации анизотропии усадки и изучено его влияние на правильность формы отверстий и их размеров. В работе использовали синтезированный в лаборатории порошок GYAGG:Ce, 1,6-гександиол диакрилат в качестве мономера, дисперсант DISPERBYK 2152 и УФ-фотоинициатор.

В результате напечатаны образцы моделей, и путем высокотемпературного спекания получена плотная керамика GYAGG:Ce. Определено влияние толщины слоя (15, 20 и 25 мкм) и времени засветки на точность и разрешение печати для этих объектов. Определена предпочтительная ориентация для масштабирования коэффициента компенсации усадки – растяжение вдоль направления печати. Рассмотрены такие коэффициенты, как 7%, 8%, 9% и 10% на отверстиях диаметром 180 и 300 мкм. В первом случае в керамике удалось достичь отверстий практически круглой формы диаметром менее 100 мкм, и их размер вдоль и перпендикулярно оси печати практически совпадал. Во втором случае их форма была слегка приплюснута по вертикальной оси.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (№ 22-13-00172-П)

Авторы выражают благодарность Смысловой Валентине Геннадьевне за синтез порошка граната, Карпюку Петру Викторовичу и Сайфутярову Расиму Рамилевичу за съёмку СЭМ-изображения сырцов и керамики.

1. Ermakova L. V. et al. Influence of luminescent properties of powders on the fabrication of scintillation ceramics by stereolithography 3D printing // *Ceramics*. 2023. V. 6. №. 1. P. 43-57.
2. Li Q. et al. Controlling the anisotropy behaviour of 3D printed ceramic cores: From intralayer particle distribution to interlayer pore evolution // *Additive Manufacturing*. 2022. V. 58. P. 103055.
3. Sun X. et al. Accuracy control of ZrO₂ ceramic with microporous structure based on 3D printing // *Journal of Alloys and Compounds*. 2025. V. 1022. P. 180130.

Синтез металлокерамического материала с матрицей на основе сплава железа, армированной TiC

Е.С. Степичев, Д.А. Геращенко

E-mail: mail@crism.ru

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

Одно из основных направлений развития инструментальных твердых сплавов — модифицирование состава и структуры связующей металлической фазы. Известно, что керметы на основе TiC , связанного сплавами железа, имеют более высокий уровень износостойкости по сравнению с композитами на традиционной связке из сплавов Ni-Mo [1]. Также использование железа экономически более выгодно [2]. Интересной разработкой являются керметы с многокомпонентной матрицей на основе железа, содержащие 30-60 об. % карбидных фаз на основе монокарбида титана. Данные материалы податливы механической обработке в мягкоотожженном состоянии и способны повышать твердость на 20% после закалки или старения [3]. Они находят применение, например, в производстве полимерных гранул, когда требуются меньшая, чем у традиционных твердых сплавов, твердость и большая жесткость и коррозионная стойкость, чем у инструментальных сталей. Работа нацелена на апробацию традиционного технологического процесса изготовления металлокерамического материала с многокомпонентной матрицей на основе железа, армированной TiC .

Изготавливали образцы керметов по традиционной для твердых сплавов технологии. Смешивали порошковые материалы исходных компонентов в планетарном смесителе в течение 2 ч с керамическими мелющими телами, пластифицировали шихту 20 % водным раствором полиэтиленгликоля, формовали смеси методом холодного одноосного прессования при 100 МПа, сушили формовки на воздухе при 100°C в течение 1 ч, спекали в вакууме. В качестве исходных компонентов использовали порошки Fe, Ni, Co, Cr, Mo, TiC .

Изготовленный материал после спекания имеет твердость 40-50 HRC в зависимости от режимов спекания и состава. Фазовый состав материалов представляет ГЦК и ОЦК структуру.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Соглашение № 21-73-30019-П).

1. Klaasen, H. Mechanical and wear behaviour of TiC -base cermets sintered by different techniques / H. Klaasen, L. Kollo, J. Kubarsepp // Proceedings of the Powder Metallurgy World Congress & Exhibition (Euro PM). – Prague : European Powder Metallurgy Association, 2005. – V. 1. – Pp. 217-222.
2. Effect of carbon content and cooling rate on the microstructure and hardness of TiC-Fe-Cr-Mo cermets / J. Navarrete-Cuadrado, T. Soria-Biurrun, L. Lozada-Cabezas [et al.] // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. – 2024. – V. 119. – P. 106552.
3. Foller, M. A new investigation on mechanical properties of ferro-titanit / M. Foller, H. Meyer // Proceedings of the 6th International Tooling Conference. – Karlstad, 2002. – Pp. 10-13.

Особенности формирования и функциональные свойства нанокристаллов смешанного ортоферрита $\text{Sc}_x\text{Lu}_{1-x}\text{FeO}_3$ ($0 \leq x \leq 1$)**С.М. Тиханова^{1,2}**

E-mail: tihanova.sof@gmail.com

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия²ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Ферриты редкоземельных элементов (РЗЭ) со структурой перовскита, в частности ортоферриты REFeO_3 , являются высокоперспективными функциональными материалами для применения в фотокатализе, спинтронике и в качестве мультиферроиков. Особый интерес представляют ферриты РЗЭ с гексагональной структурой ($h\text{-REFeO}_3$), которые обладают более развитой удельной поверхностью, узкой запрещенной зоной и, как следствие, повышенной фотокаталитической активностью в видимой области спектра. Ключевой проблемой, ограничивающей их широкое применение, является метастабильность гексагональной фазы, получение которой в чистом виде традиционными методами синтеза затруднено.

В данной работе для стабилизации гексагональной фазы был предложен подход, основанный на допировании ортоферрита лютеция (LuFeO_3) катионами скандия (Sc) с формированием смешанного ортоферрита $\text{Sc}_x\text{Lu}_{1-x}\text{FeO}_3$ [1]. Нанокристаллы синтезированы энергоэффективным методом растворного горения с последующей мягкой термообработкой.

Было показано, что увеличение содержания скандия приводит к фазовому переходу от орторомбической ($Pbnm$) к гексагональной ($P63cm$), а затем к кубической ($Ia-3$) структуре. Важнейшим результатом является стабилизация гексагональной фазы в широком интервале замещения (10–90 мол. % Sc), при этом область чистых однофазных образцов $h\text{-Sc}_x\text{Lu}_{1-x}\text{FeO}_3$ была достигнута при содержании скандия 50–80 мол. % [2]. Среди всех исследованных составов, образец со стехиометрией $h\text{-Sc}_{0.5}\text{Lu}_{0.5}\text{FeO}_3$ продемонстрировал наивысшую фотокаталитическую активность в реакции фото-Фентоноподобного разложения метилового синего под видимым светом, достигнув полной деградации красителя за 30 минут. Фотокаталитическая активность гексагонального смешанного феррита скандия-лютеция превзошла как орторомбический LuFeO_3 , так и кубический ScFeO_3 [3]. Высокая активность $h\text{-Sc}_{0.5}\text{Lu}_{0.5}\text{FeO}_3$ обусловлена узкой запрещенной зоной (1.97 эВ), мезопористой структурой и специфическим электронным строением.

Дополнительные исследования подтвердили низкую цитотоксичность полученных наноматериалов и их управляемые магнитные свойства, что открывает путь к созданию на их основе многофункциональных материалов для экологического катализа и биомедицины.

Таким образом, предложенный метод получения смешанных ортоферритов редкоземельных элементов растворным горением с последующей термообработкой позволяет целенаправленно синтезировать стабильные гексагональные смешанные ферриты лютеция-скандия с рекордной фотокаталитической активностью в видимой области спектра.

1. Tikhanova S.M. et al. Synthesis and phase transformations of hexagonal, orthorhombic, and cubic $\text{Sc}_x\text{Lu}_{1-x}\text{FeO}_3$ ($0 \leq x \leq 1$) nanocrystals // *Ceram. Int.* 2023. V. 49. No. 24. P. 40166-40173
2. Tikhanova S.M. et al. Hexagonal $\text{Sc}_x\text{Lu}_{1-x}\text{FeO}_3$ nanocrystals: Promising photocatalysts for visible-light-driven methyl violet degradation // *J. Alloys Compd.* Elsevier. 2025. V. 1018. P. 179029.
3. Tikhanova S.M. et al. Visible-light-active and biocompatible $\text{Sc}_x\text{Lu}_{1-x}\text{FeO}_3$ ($x = 0, 0.5, 1.0$) photocatalysts with magnetic functionality // *Chem. Eng. J.* 2025. V. 522.

Влияние отклонений от стехиометрии и со-активации Mg^{2+} на характеристики сцинтилляционной керамики состава $(Gd_{1-x-y}Y_xLu_y)_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$ (GYLAGG:Ce)

Л.Д. Тонова^{1,2}, В.Г. Смыслова¹, В.В. Дубов¹, П.В. Карнюк¹, И.Ю. Комендо^{1,2}, М.В. Коржик^{1,3}

E-mail: Tonova_LD@nrcki.ru

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия

³Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

Прозрачная сцинтилляционная керамика на основе сложных оксидов со структурой граната имеет ряд преимуществ перед монокристаллическими аналогами: меньшую температуру получения, сниженные требования к производственной оснастке, состав керамики возможно широко варьировать, достигая при этом быстрой кинетики высвечивания, высокого выхода сцинтилляций и других функциональными характеристиками [1]. Ранее было установлено, что керамика состава $(Gd,Y,Lu)_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$ (GYLAGG:Ce) обладает высоким световыходом – около 31 000 фот./МэВ, однако в кинетике сцинтилляций наблюдаются медленные компоненты [2]. Варьирование концентраций ионов Gd^{3+} и Y^{3+} в составе позволяет улучшить оптические характеристики керамики с сохранением световыхода, а введение добавки Mg^{2+} – ускорить кинетику высвечивания [3].

Исследование направлено на изучение влияния отклонений от стехиометрии на люминесцентные, оптические и сцинтилляционные свойства керамики $(Gd,Y,Lu)_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$ с добавкой Mg^{2+} .

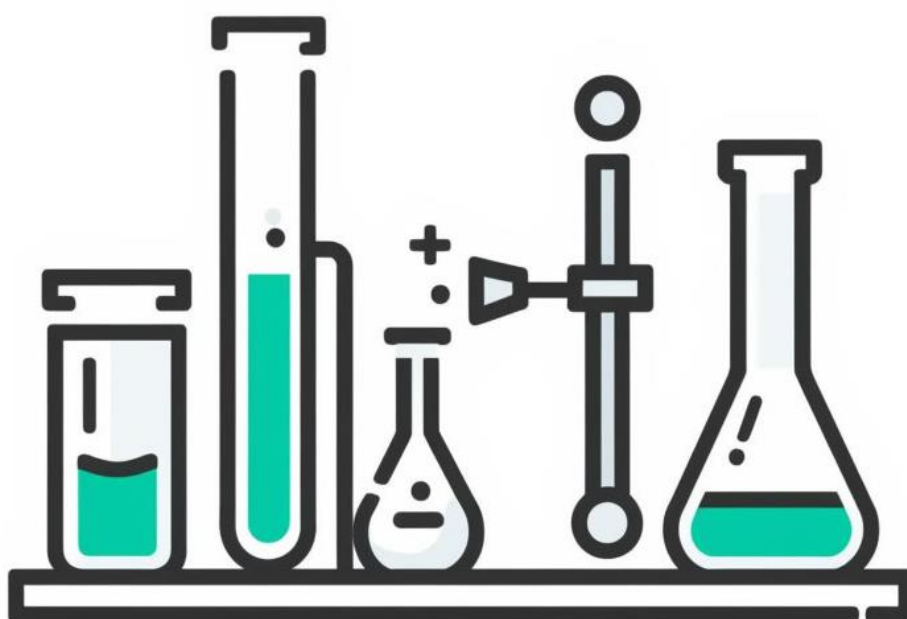
Методом обратного осаждения из смесевых азотнокислых растворов с последующей термообработкой синтезировали оксидные порошки трёх составов, содержащих 1) избыток Gd 2,5 мол.% относительно стехиометрии, 2) недостаток Ga 2,5 мол.%, 3) избыток Gd и недостаток Ga в количестве 2,5 мол.%. Порошки измельчали в планетарной мельнице и в подготовленную шихту вносили добавку Mg^{2+} в виде раствора $Mg(NO_3)_2$. Компактирование проводили методом одноосного прессования, после чего заготовки спекали в атмосфере кислорода при 1720°C.

Наибольшее пропускание продемонстрировали образцы, имеющие отклонение от стехиометрии -2,5% Ga, +2,5% Gd и не содержащие MgO. Наибольшее значение интенсивности люминесценции продемонстрировали образцы состава GYLAGG:Ce (+2,5% Gd, -2,5% Ga) – 1,15 у.е. Рентгенофазовый анализ показал, что образцы с отклонением от стехиометрии сохраняют однофазность, а введение избытка Gd приводит к росту параметра решётки. Эффективное время затухания определяли по кинетическим кривым: самую быструю кинетику затухания демонстрируют образцы с одновременным избытком Gd и дефицитом Ga и добавлением Mg^{2+} (55-60 нс). Кроме того, у этих же образцов, но без Mg^{2+} , наблюдается максимальный световыход при возбуждении гамма-квантами с энергией 662 кэВ источника ^{137}Cs , оцененный в 41 500 фот./МэВ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-30014, <https://rscf.ru/project/25-73-30014>. Аналитические исследования выполнены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ «Курчатовский институт».

1. Gektin A. Inorganic scintillators for detector systems / A. Gektin. – Berlin, Germany: Springer, 2017. – P.20-77.
2. Role of the dilution of the Gd sublattice in forming the scintillation properties of quaternary $(Gd, Lu)_3Al_2Ga_3O_{12}: Ce$ ceramics / M. Korzhik [et.al.] // Crystals. 2022. V. 12. I. 9. P. 1196.
3. Advanced transparent scintillation ceramics $(Gd, Lu, Y)_3Al_2Ga_3O_{12}: Ce, Mg$ for a novel generation of PET scanners / M. Korzhik [et al.] // Optical Materials. 2024. V. 151. P. 115334.

Химия неорганических материалов и гибридных органонеорганических систем



Изучение твердых растворов системы $M_{2-x}M'_xZn_3(P_2O_7)_2$ ($M, M' = K, Rb, Cs$)**Е.Г. Аксентьева^{1,2}, Д.И. Цыганкова^{1,3}, О.Ю. Синельщикова¹, Е.С. Деркачева¹**

E-mail: seniakategeo@gmail.com

¹ Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт химии силикатов им. И.В. Гребеникова, Санкт-Петербург, Россия² Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия³ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Цинкофосфаты щелочных металлов особенно интересны как основа для получения люминофоров для светодиодов и нелинейно-оптических материалов, прозрачных в УФ-диапазоне [1]. Такое применение связано с тем, что катионы щелочных металлов не имеют d-d или f-f переходов, что увеличивает ширину запрещенной зоны, в то время как атомы металлов, такие как цинк, способствуют получению гибких блоков тетраэдров, что значительно расширяет разнообразие формирующихся структурных мотивов. При этом отмечено, что они склонны к частому проявлению изоморфных замещений в кристаллической решетке [2], что позволяет ожидать формирование протяженных твердых растворов.

В данной работе представлены результаты изучения фазообразования в двойных системах, образующих треугольник $K_2Zn_3(P_2O_7)_2$ - $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$ - $Cs_2Zn_3(P_2O_7)_2$. Твердые растворы в данных системах в первую очередь перспективны как исходные матрицы для синтеза люминофоров и возможные новые нелинейно-оптические материалы.

Синтез поликристаллических образцов крайних членов разреза проведен методом твердофазных реакций из KPO_3 , $RbNO_3$, Cs_2CO_3 , ZnO и $NH_4(H_2PO_4)$. Исходные реагенты измельчали и гомогенизировали в планетарной мельнице. Далее образцы прессовали в таблетки и проводили обжиг в две стадии. Температуры первого обжига составляли 400–550 °С и были выбраны в зависимости от температур разложения используемых реагентов, а второго – исходя из температурной стабильности синтезируемых соединений. Однофазный цинкофосфат рубидия получен обжигом при 650 °С, калия при 730 °С, а цезия при 750 °С. Между стадиями обжига проводилось промежуточное измельчение и прессование образцов. Соотношения исходных компонентов соответствовало стехиометрии крайних членов разреза ($K_2Zn_3(P_2O_7)_2$, $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$, $Cs_2Zn_3(P_2O_7)_2$). Полученные таким образом составы использовали для синтеза образцов цинкофосфатов, содержащих два щелочных металла. В соответствии с соотношениями порошки сложных оксидов смешивали, после чего прессовали и обжигали в интервале температур 650–750 °С. Температура и длительность термообработки подбирались для каждого состава индивидуально по результатам РФА продуктов реакции.

Таким образом были получены новые сложные оксиды общей формулы $M_{2-x}M'_xZn_3(P_2O_7)_2$ ($M = K, Rb, Cs$) на основе структуры $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$ (пр. гр. $P2_1$) в концентрационных интервалах: $Cs_{2-x}Rb_xZn_3(P_2O_7)_2$ при $1.6 \leq x \leq 2.0$, $K_{2-x}Rb_xZn_3(P_2O_7)_2$ при $0.6 \leq x \leq 2.0$ и $K_{2-x}Cs_xZn_3(P_2O_7)_2$ при $0.4 \leq x \leq 0.6$. Твердый раствор на основе $Cs_2Zn_3(P_2O_7)_2$ (пр. гр. $P2_1/c$) образуется в образцах состава $Cs_{2-x}Rb_xZn_3(P_2O_7)_2$ при $0.0 \leq x \leq 1.2$. Фаза на основе $K_2Zn_3(P_2O_7)_2$ (пр. гр. $P2_12_12_1$) ограничена составами $K_{2-x}Rb_xZn_3(P_2O_7)_2$ и $K_{2-x}Cs_xZn_3(P_2O_7)_2$ при $0.0 \leq x \leq 0.2$.

Работа выполнена в рамках государственного задания филиала НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИХС, тема 1024030700042-1-1.4.3

1. Liu Q., Dang P., Zhang G., Lian H., Li G., Molokeev M.S., Cheng Z., Lin J. Broad luminescence tuning in Mn^{2+} -doped $Rb_2Zn_3(P_2O_7)_2$ via doping level control based on multiple synergies // CrystEngComm. 2022. V. 24. N 31. P. 5622–5629.
2. Лапшин А.Е. Синтез и кристаллическая структура низкотемпературной модификации $LiKZnP_2O_7$ / А.Е. Лапшин., М.А. Петрова // Физика и химия стекла. 2009. Т. 35. №. 6 С. 841–847.

Модификация наноалмазов детонационного синтеза винилтриэтоксисиланом для разработки защитных покрытий

Е.Н. Евдокимова¹, В.А. Артемьева^{1,2}, Н.К. Тарасова^{1,2}

E-mail: Ekaterin4-evdokimova@yandex.ru

¹Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова Научно-исследовательского центра Курчатовского института - Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова Санкт-Петербург, Россия

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

Под действием естественных процессов коррозии происходит разрушение металлических конструкций, что приводит к уменьшению срока эксплуатации и увеличению финансовых издержек [1]. Одним из путей решения данной проблемы является применение защитных покрытий на основе эпоксидной смолы, ввиду ее хороших защитных свойств, с добавками модифицированных углеродных наночастиц, в частности наноалмазов. Наноалмазы детонационного синтеза (ДНА) представляют собой особый класс материалов, который широко используется в покрытиях для повышения механических характеристик. За счет большого количества разнообразных поверхностных функциональных групп наноалмазы легко подвергаются модификации, что расширяет области практического применения ДНА в качестве эффективных наполнителей для создания антикоррозионных покрытий [2].

Целью данного исследования является разработка новых защитных покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы и модифицированных винилтриэтоксисиланом (ВТЭОС) наноалмазов.

На первом этапе работы были получены модифицированные винилтриэтоксисиланом наноалмазы детонационного синтеза (ДНА-ВТЭОС). Синтез заключался во взаимодействии водно-этанольного раствора ВТЭОС с наноалмазами в течение 4 часов при 65°C. Модификация проходила с образованием связей –O–Si– за счет взаимодействия фрагмента —Si(ОСН₂СН₃)₃ молекул модификатора и гидроксильных групп на поверхности ДНА. Полученные модифицированные наночастицы были исследованы методами ИК-Фурье спектроскопии и СЭМ, был проведен тест на дисперсию.

На втором этапе работы модифицированные наночастицы ДНА-ВТЭОС были введены в циклоалифатическую эпоксидную матрицу при различных массовых соотношениях. Покрытие с содержанием добавки в количестве 3 мас. % показало увеличение краевого угла смачивания (КУС) с 71° до 80° по сравнению с эпоксидной матрицей без наполнителей и характеризовалось высоким значением твердости (0,75 усл.ед.). Введение наполнителей - слюды-мусковит и диоксида титана привело к резкому снижению КУС до 63°.

С целью повышения краевого угла смачивания и механических свойств покрытий модифицированные наночастицы ДНА-ВТЭОС были введены в состав гибридного связующего - модифицированной эпоксидной матрицы полиметилметоксисилесквиоксаном (ST-830). Полученное покрытие показало увеличение краевого угла смачивания до 86°, твердость при этом составила 0,73 усл.ед. Введение наполнителей (слюда -мусковит и диоксид титана) привело к снижению КУС всего на 1 градус.

В настоящее время составы с эпоксидной и гибридной матрицами с содержанием ДНА-ВТЭОС 3 и 5 мас. % направлены для исследования стойкости к атмосферной коррозии во влажном тропическом климате в СР Вьетнам.

1. Ahmad D. et al. Hydrophilic and hydrophobic materials and their applications // Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects. 2018. V. 40. № 22. P. 2686–2725.
2. Hajiali F., Shojaei A. Silane functionalization of nanodiamond for polymer nanocomposites-effect of degree of silanization // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2016. V. 506. P. 254-263.

Обоснование выбора параметров производства листового проката из высокопрочной хромоникельмолибденовой стали

К.Ю. Куртева, Е.А. Яковлева

E-mail: mail@crism.ru

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

Хромоникельмолибденовая сталь с бейнитно-мартенситной структурой широко используются в судостроении благодаря высокому сочетанию прочностных, вязкопластических свойств, хладостойкости и хорошей свариваемости [1]. Одной из основных задач в области судостроения является не только разработка технологий и освоения производства высокопрочной стали, но и постоянное совершенствование технологий с целью достижения необходимого технико-экономического эффекта производства - увеличение выхода годного продукта и снижение энергозатрат. Традиционной технологией производства высокопрочной судостроительной стали является закалка с печного нагрева с высоким отпуском, однако, в настоящее время для высокопрочной стали также внедрена малоэнергозатратная технология прямой заковки с прокатного нагрева с высоким отпуском для массового производства листового проката. Производство листового проката в толщинах 8-20 мм с использованием вышеупомянутых технологий ввиду более высоких скоростей охлаждения при заковке и формированием большой доли низкотемпературных структур реечной морфологии приводит к тому, что значения предела текучести значительно превышают нормы технической документации, тем самым существенно повышая выхода продукта, не соответствующего требованиям.

Целью работы являлось усовершенствование режимов производства и получение требуемого уровня прочностных характеристик листового проката на основе исследования микроструктуры и механических свойств высокопрочной бейнитной стали после заковки с отпуском и прямой заковки с прокатного нагрева с отпуском. Для оценки состояния аустенита перед ускоренным охлаждением также был проведен текстурный анализ стали [2].

Объектом исследования является листовой прокат из высокопрочной стали марки 09ХН2МД, изготовленный с применением технологии заковки с прокатного нагрева с отпуском по трем различным режимам деформации на финальной стадии прокатки и листового проката, изготовленный с применением технологии заковки с печного нагрева с различными режимами отпуска.

Показано, что увеличение наклепа аустенита перед ускоренным охлаждением при прямой заковке с прокатного нагрева приводит к формированию бейнита гранулярной морфологии и, как следствие, снижению прочностных характеристик стали при сохранении вязкопластических. Для предотвращения формирования слоя с измененной структурой на поверхности листового проката и соответствующего ухудшения механических свойств при использовании технологии заковки с печного нагрева с отпуском температура нагрева должна быть ограничена температура нагрева под заковку и температура отпуска.

На основе выполненных исследований разработаны рекомендации по выбору режимов горячей пластической деформации листового проката из высокопрочной стали в зависимости от конечной толщины листа, изготавливаемого по технологии прямой заковки с прокатного нагрева с отпуском и режимы термической обработки при использовании технологии заковки с печного нагрева с отпуском.

1. Рыбин В.В., Малышевский В.А., Хлусова Е.И. Высокопрочные свариваемые улучшаемые стали-СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2016- 212 с.
2. Jonas, J.J., Transformation textures associated with steel processing, Microstructure and Texture in Steels, 2009, New York: Springer, pp. 3–17.

**Разработка тонких фторлегированных плёнок SnO₂ с высокой проводимостью:
оптимизация для опто- и микроэлектроники**

А.И. Кушакова^{1,2}, А.С. Коваленко¹, А.М. Николаев¹, О.А. Шилова^{1,2}

E-mail: anastasia.kushakova@mail.ru

¹Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра — Институт химии силикатов им. И.В. Гребениčkова, Санкт-Петербург, Россия

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

Диоксид олова (SnO₂) – перспективный материал для прозрачных электропроводящих пленок, применяемых в электронике, фотонике, солнечных элементах и сенсорах благодаря высокой прозрачности, стабильности и доступности [1]. Фторирование улучшает электропроводность за счет повышения концентрации носителей заряда, но может снижать прозрачность из-за рассеяния света. Золь-гель метод, использованный для синтеза, обеспечивает простоту, экономичность и контроль структуры [2].

Цель исследования – изучение влияния условий синтеза фторированных пленок SnO₂ на их прозрачность и электропроводность. Для этого готовили растворы хлорида олова(II) с фторидом аммония в этаноле, бутаноле-1 или изопропанол, наносили их на стеклянные подложки методом спин-коатинга и проводили термообработку при 450° (оптимальной температуре для удаления хлора, что подтверждено элементным анализом).

Первоначальная оптимизация проводилась с использованием статистической обработки по методу латинского квадрата с варьированием растворителя (этанол, бутанол-1, изопропанол), содержания фтора (5–15 ат.%) и числа слоев (10–20). Прозрачность, измеренная УФ-видимым спектрофотометром, составила 68–86%. Наилучший результат (86%) достигнут с этанолом при 5–10 ат.% фтора и 10–15 слоях благодаря низкой вязкости растворителя, обеспечивающей равномерное покрытие. Увеличение фтора до 15 ат.% или слоев до 20 снижало прозрачность до 68–77% из-за роста кристаллитов и усиления рассеяния света.

Дальнейшее исследование сосредоточилось на использовании растворов на основе этанола с низким и средним содержанием фтора (5 и 10 ат.%) и числом слоев от 15 до 30. Лучшая прозрачность достигнута для пленок с 5 ат.% фтора и 20 слоями (81%), а также с 10 ат.% фтора и 25 слоями (76%), обеспечивая высокий уровень светопропускания. Худшие показатели прозрачности наблюдались для образцов с 5 ат.% фтора и 30 слоями (72%), а также с 10 ат.% фтора и 30 слоями (75%), что связано с дефектами и рассеянием света. Удельное поверхностное сопротивление было минимальным для тех же образцов с высокой прозрачностью (5 ат.% фтора и 20 слоев, 10 ат.% фтора и 25 слоев), тогда как максимальное сопротивление зафиксировано для образцов с худшей прозрачностью, что указывает на нелинейную связь между толщиной, допированием и свойствами.

Таким образом, оптимальными параметрами для синтеза являются этанол, 5–10 ат.% фтора, 20–25 слоев – обеспечивают прозрачность 77–81% и низкое сопротивление, делая пленки подходящими для оптоэлектроники. Для улучшения свойств при большей толщине рекомендуется изучить допирование.

1. Jiang L., Li Q., Li B., Guo S., Li S., Zhang X., Tang X. Efficient and stable perovskite solar cells via oxalic acid doped SnO₂ nanocrystals with surface-defect passivation // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2024. Vol. 702, P. 2, 135052. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2024.135052>.
2. Белоусов С. А., Носов А. А., Меньшикова Т. Г., Рембеза С. И. Электрофизические свойства металлооксидных пленок SnO₂, изготовленных по золь-гель технологии // Вестник ВГТУ. 2016. №2.

Активность наноструктурированного полтитаноксида, легированного наночастицами серебра в полимерных матрицах, в реакциях фотокаталитического разложения фенола

А.С. Носкова, Е.В. Саломатина, Л.А. Смирнова

E-mail: noskova_alna@ro.ru

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

В современных реалиях проблема очистки сточных вод приобретает особую остроту в связи с постоянно возрастающей антропогенной нагрузкой на водные экосистемы. В последние годы особое внимание привлекает фотокаталитическая очистка сточных вод как перспективный способ сохранения водных ресурсов планеты. Значимое место среди фотокатализаторов занимает диоксид титана (TiO_2) анатазной полиморфной модификации, благодаря экологической безопасности, высокой фотокаталитической активности [1]. Однако повсеместное применение порошкообразного TiO_2 в качестве фотокатализатора ограничивается вследствие его спектральной чувствительности только к УФ-излучению, рассеивания света на крупных частицах и высокой степени рекомбинации носителей заряда, образующихся при УФ-индуцированном одноэлектронного перехода $\text{Ti}^{4+} + e^- \rightarrow \text{Ti}^{3+}$. Перспективными методами повышения фотокаталитической активности TiO_2 и расширения его рабочего диапазона длин волн является наноструктурирование и легирование наночастицами (НЧ) металлов с плазмонным резонансом в видимой области спектра, например, НЧ Ag [2].

В данной работе получены оптически прозрачные органо-неорганические композиты, содержащие наноструктурированный полтитаноксид (ПТО) анатазной полиморфной модификации, легированный НЧ серебра в полимерных матрицах различной природы. Образцы получены поликонденсационно-полимеризационным методом из изопропоксида титана, гидроксиэтилметакрилата и акрилонитрила. НЧ серебра формировали *in situ* в полимерной матрице при УФ-восстановлении AgNO_3 , процессом контролировали спектрофотометрически. Образование НЧ ПТО анатазной полиморфной модификации размером ~ 10 нм и НЧ Ag размером 12-30 нм доказано методами РФА и СЭМ. Методом ЭПР-спектроскопии для нанокомпозитов выявлено образование активных окислительных форм кислорода, генерируемых в ПТО при световом воздействии в результате обратимого негомолитического разрыва связи Ti-O при протекании одноэлектронного перехода $\text{Ti}^{4+} + e^- \rightarrow \text{Ti}^{3+}$. Актинометрическим методом установлено, что квантовый выход этой реакции в нанокомпозитах составляет $\sim 50\%$, что существенно превышает квантовый выход порошкообразного TiO_2 (не более 20%). Легирование полтитаноксида НЧ Ag приводит к снижению его ширины запрещенной зоны с 3,35 эВ до 2,00 эВ, что позволяет использовать излучение видимого диапазона длин волн для активации фотокаталитических процессов. Фотокаталитическая активность разработанных нанокомпозитов была изучена в реакциях фотоокисления фенола в воде при действии как УФ-, так и видимого света. Исследовано влияние состава нанокомпозитов, размера частиц их порошков, соотношения фотокатализатор:фенол в воде на глубину и скорость фотодеградациии фенола. Анализы общего содержания углерода и концентрации фенола в воде после завершения процесса показали, что при действии УФ-света в течение 400 минут происходит окисление фенола на $\sim 90\%$ до углекислого газа и воды.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского Научного фонда, проект № 23-74-10069.

1. Hummer D.R. et al. Origin of Nanoscale Phase Stability Reversals in Titanium Oxide Polymorphs // J. Phys. Chem. C. 2009. Vol. 113, № 11. P. 4240–4245.
2. Zhang J. et al. New understanding of the difference of photocatalytic activity among anatase, rutile and brookite TiO_2 // Phys. Chem. Chem. Phys. 2014. Vol. 16, № 38. P. 20382–20386.

Применение систем $\text{Fe}_x\text{Mo}_y\text{O}_n$, полученных методом карботермического шока, в качестве катализаторов для реакции восстановления азота

Саков Д.А.

E-mail: sakov@pish.itmo.ru

Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Одним из наиболее актуальных направлений междисциплинарных исследований в настоящее время является поиск альтернативных методов синтеза соединений, используемых в химической промышленности. В частности, остро стоит вопрос получения «зелёного» аммиака, так как крупнотоннажное производство аммиака основано на процессе Габера, ключевыми недостатками которого являются низкая энергоэффективность и выброс большого количества парниковых газов в атмосферу [1]. Наиболее привлекательной альтернативой для промышленного применения на данный момент служит получение аммиака реакцией электрокаталитического восстановления азота.

Нами был синтезирован ряд систем вида $\text{Fe}_x\text{Mo}_y\text{O}_n$ ($x, y = 1-4$) методом карботермического шока, нашедшего применение для *in situ* синтеза высокоэнтропийных сплавов на поверхности углеродного носителя [2]. Для определения структуры образцов были использованы методы рентгенофазового анализа и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. Наблюдается равномерное распределение частиц катализатора на поверхности носителя, средний размер которых равен 200-400 нм.

Оценка эффективности полученных образцов проводилась в ячейке Н-типа, в качестве электролитов были использованы 0,1М HCl и 0,5 М LiClO₄. С целью улучшения эффективности реакции осуществлялось насыщение рабочей зоны ячейки азотом в течение 30 минут. Все образцы тестировались в течение 1 ч при значении потенциала -1 В vs Ag/AgCl. Наилучшие результаты показал образец с соотношением элементов Fe:Mo = 1:3; выход аммиака составил 0,167 мг/см²·ч, а Фарадеевская эффективность сильно зависит от используемого электролита – 0,28% при использовании 0,5 М LiClO₄ и 1,56% для 0,1 М HCl.

Ключевым направлением дальнейшей оптимизации стоит считать повышение Фарадеевской эффективности реакции, что может быть достигнуто за счёт модифицирования методики синтеза, а также применения других электролитов.

Работа выполнена в рамках государственного задания (проект FSER-2025-0016).

1. Wang, M. Can sustainable ammonia synthesis pathways compete with fossil-fuel based Haber–Bosch processes? / M. Wang et al. // Energy & Environmental Science. – 2021. – V. 14. – P. 2535-2548.
2. Hu, Ch. Rapid carbothermic shock synthesis of high-entropy oxides as highly stable oxygen evolution reaction catalysts / Ch. Hu et al. // Journal of Power Sources. – 2025. – V. 655, 237967.

Разработка защитных покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы, модифицированной частицами WO₃–PDMS

Тарасова Н.К.^{1,2}, Фролова А.А.^{1,2}

E-mail: Ngolubeva99@yandex.ru

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

²*Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова Научно-исследовательского центра Курчатовского института - Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова Санкт-Петербург, Россия*

Проблема биообрастания материалов стоит на одном из первых мест среди других проблем разрушения материалов. Любая поверхность, погруженная в морскую воду, подвергается заселению морскими организмами (бактериями, водорослями, моллюсками). Эта нежелательная колонизация имеет серьезные последствия, в частности, для судостроительной отрасли, приводя к ухудшению состояния поверхностей, увеличению шероховатости, увеличению расхода топлива и потере маневренности судов [1]. Биокоррозия металлов или бетонных конструкций ежегодно приводит к огромным экономическим потерям, неисправности оборудования и выбросу токсичных веществ в окружающую среду [2]. Наиболее распространенной стратегией борьбы с биокоррозией является использование полимерных биостойких покрытий [3].

Цель данного исследования заключалась в разработке защитных антикоррозионных покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы с частицами WO₃, модифицированными полидиметилсилоксаном.

На первом этапе методом осаждения были получены наночастицы оксида вольфрама. Затем синтезированные наночастицы WO₃ модифицировали с помощью полидиметилсилоксана (PDMS) для повышения гидрофобности. Модификацию проводили следующим образом: наночастицы диспергировали в этаноле, содержащем PDMS. Смесь перемешивали при комнатной температуре в течение 12 ч. Затем модифицированные частицы промывали и сушили. В результате были получены частицы WO₃–PDMS.

Наночастицы WO₃ и модифицированные частицы WO₃–PDMS были исследованы с помощью сканирующей электронной микроскопии. Кластеры из наночастиц оксида вольфрама образуют сферические формы размером от 1 до 3 мк, которые состоят из наноразмерных пластинок. После модификации заметно изменяется морфология наночастиц. Модифицированные наночастицы имеют пластинчатую форму. Размер частиц меньше 1 мк.

Было проведено исследование влияния частиц WO₃–PDMS на краевой угол смачивания покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы. Введение в эпоксидную смолу 3 мас. % модифицированных частиц повышает краевой угол смачивания покрытий от 71° до 93°.

В данный момент проводятся испытания разработанных покрытий на биообрастание и атмосферную коррозию в условиях влажного тропического климата (СР Вьетнам).

1. Elaine A., Rosa P., Francisco L. et. al. Corrosion protection with polyaniline and polypyrrole as anticorrosive additives for epoxy paint // Corrosion science 2008 V.50 P. 721-728.
2. Matjaz F. et al. Application of corrosion inhibitors for steels in acidic media for the oil and gas industry: A review // Corrosion science. 2014. V. 86. P. 17-41.
3. Wei T. et al. Polyurethane coatings modified by OH-PDMS for anti-cavitation, antifouling and anticorrosion applications // Progress in organic coatings. 2023. V. 179. P. 107515.

**Исследование влияния состава защитной газовой смеси на характеристики
напавленного антикоррозионного покрытия оборудования АЭУ**

Г.Б. Фомин, И.А. Морозовская

E-mail: mail@crism.ru

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

При изготовлении оборудования для атомных энергетических установок с водным теплоносителем одной из наиболее трудоемких операций является наплавка антикоррозионного покрытия на внутреннюю поверхность корпусов из стали перлитного класса со стороны рабочей среды [1,2].

В настоящее время разработана и внедрена в промышленности технология полуавтоматической наплавки в среде защитных газов антикоррозионного покрытия плавящимся электродом в импульсном режиме, позволяющая повысить производительность труда по сравнению с ручной дуговой наплавкой покрытыми электродами при выполнении коррозионностойких покрытий деталей и узлов оборудования атомных энергетических установок любой конфигурации с обеспечением требуемого качества напавленного металла и зоны сплавления [3,4].

В работе приведены результаты исследований химического состава металла наплавки в зависимости от применяемой защитной газовой смеси.

Проведена оценка влияния содержания CO₂ в газовой смеси на содержание углерода в металле антикоррозионного покрытия.

Показано, что импульсная аргонодуговая наплавка обеспечивает стабильный химический состав напавленного металла на высоте 4 мм от границы сплавления.

С учётом проведенных исследований разработаны дополнительные рекомендации по корректировке химического состава проволоки для наплавки однородных коррозионностойких покрытий импульсной технологией плавящимся электродом в среде защитных газов.

1. Цуканов В. В. Современные стали и технологии в энергомашиностроении. – СПб.: АНО ЛА «Профессионал», 2014. – 464 с.
2. Конструкционные материалы АЭС / Ю. Ф. Баландин, И. В. Горынин и др. – М.: Энергоатомиздат, 1984. 280 с.
3. Морозовская И. А., Тимофеев М. Н., Фомин Г. Б., Котилло М. С. Исследование структуры и свойств напавленного антикоррозионного покрытия оборудования судовых реакторных установок из Cr–Mo–V стали, выполненного импульсным аргонодуговым способом // Тяжелое машиностроение. – 2025. – № 3. – С. 2–10.
4. Карасев М. В., Колодяжный Д. Ю., Федюкин С. В. Проблемы и перспективы импульсно-дуговой сварки плавящимся электродом в защитном газе // Сварка и диагностика. – 2018. – № 5. – С. 60–62.

Разработка антикоррозионных покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы, модифицированной полиметилметоксисилсесквиоксаном

Фролова А.А.^{1,2}, Тарасова Н.К.^{1,2}

E-mail: franastasia17@mail.ru

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

²Филиал Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова Научно-исследовательского центра Курчатовского института - Институт химии силикатов им. И. В. Гребеникова Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время ведутся разработки различных антикоррозионных покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы для защиты металлических конструкций от разрушений. Циклоалифатическая эпоксидная смола обладает низкой вязкостью и устойчивостью к УФ-излучению, но ее недостатком является хрупкость после отверждения, что приводит к ухудшению коррозионной стойкости. Для решения данной проблемы используется химическая модификация исходной полимерной матрицы.

Целью нашего исследования является разработка антикоррозионных покрытий на основе циклоалифатической эпоксидной смолы марки ST-3000 (EP), модифицированной полиметилметоксисилсесквиоксаном (PMSS).

Синтез модифицированного связующего осуществлялся в две стадии за счет взаимодействия EP и PMSS. На первой стадии EP выдерживали при 80°C в течение 1 часа. Затем добавляли аминопропилтриэтоксисилан (APTES) при постоянном перемешивании. На второй стадии синтеза вводили PMSS и выдерживали смесь при 80°C в течение 40 минут. В конце отгоняли метиловый спирт (CH₃OH) при пониженном давлении. Таким образом, было синтезировано 5 составов связующих с процентным соотношением EP к PMSS равным 75:25, 70:30, 80:20, 90:10 и 95:5 соответственно.

Затем на основе полученных связующих были разработаны композиции с добавлением TiO₂ и слюды-мусковита. Для сравнения физико-механических свойств была приготовлена композиция на основе заранее химически немодифицированной EP с использованием таких же наполнителей. Для получения покрытий в полученные композиции предварительно добавляли отвердитель аминного типа Джеффамин Т-403 в пересчете на полимерное связующее.

Предварительная химическая модификация EP с помощью PMSS (90:10) повышает твердость покрытия (от 0,45 до 0,56 усл. ед.), прочность при ударе (от 30 до 40 см), а также эластичность при изгибе (от 3 до 1 мм) по сравнению с покрытием на основе предварительно химически немодифицированной EP.

Для исследования антикоррозионных свойств покрытий был выбран состав на основе химически модифицированной EP с помощью PMSS (90:10), который наносили на металлические пластины. Покрытия показали высокую стойкость к атмосферной коррозии. После 8 месяцев испытаний на поверхности покрытий видимых следов коррозии не наблюдалось, цвет покрытий не изменился.

1. Ong, S., Ismail, J., AbuBakar, M., Rahman, I.A., Sipaut, C.S., Chee, C.K. Polyurethane-modified epoxy resin: solventless preparation and properties// J. Appl. Polym. Sci. 2009. Vol. 111, no. 6. P. 3094-3103
2. Enhanced corrosion resistance of epoxy coatings through the incorporation of modified TiO₂ and reduced graphene oxide. Yu Qi, PengWu, Tengfei Huo, Zhuoyi Li, Xueli Li, Yantu Zhang.

Исследование сегнетоэлектрического материала на основе BaTiO_3 и малощелочного алюмоборосиликатного стекла

Д. И. Цыганкова^{1,2}, О. Ю. Синельщикова^{1,2}, А. В. Тумаркин², Н. Г. Тюрнина¹, З. Г. Тюрнина^{1,2}, Е. А. Балабанова^{1,2}

E-mail: daracygankova3@gmail.com

¹Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра — Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова, Санкт-Петербург, Россия

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

Разработка диэлектрических материалов является актуальной областью исследований, включающей создание устройств на основе стеклянных и керамических компонентов. Керамические диэлектрики характеризуются высокой температурой спекания и значительной пористостью, что ограничивает их применение. В то же время стеклянные диэлектрики демонстрируют низкую диэлектрическую проницаемость, слабую теплопроводность и иногда малую механическую прочность. Для устранения этих недостатков предложено использование композитных материалов, сочетающих керамический наполнитель и стеклообразный связующий. Такой подход позволяет получать стеклокерамические изделия с низкой пористостью и заданными электромагнитными параметрами при умеренных температурах термообработки [1, 2].

Особое внимание уделяется сегнетоэлектрическим наполнителям, обладающим спонтанной поляризацией в двух или более направлениях, изменение которой происходит при воздействии внешнего электрического поля [3]. Наиболее распространённым сегнетоэлектриком является титанат бария, благодаря его высоким сегнетоэлектрическим свойствам.

Целью данной работы является синтез и исследование стеклокерамического композита из малощелочного алюмоборосиликатного стекла и титаната бария.

Методом низкотемпературного спекания успешно получены стеклокерамические композиты на основе малощелочного алюмоборосиликатного стекла и титаната бария, смешанных в различных пропорциях. Рентгенофазовый анализ показал, что образцы состоят из смеси титаната бария, стеклофазы и фресноита. Несмотря на образование фазы фресноита $\text{Ba}_2\text{TiSi}_2\text{O}_8$ в результате взаимодействия BaTiO_3 со стеклом при температуре 800 °С, получены стеклокомпозиты с низким водопоглощением (0,22–0,36 %) и высокой диэлектрической проницаемостью. Исследование диэлектрических свойств выполнялось в микроволновом диапазоне. Диэлектрическая проницаемость полученных композитов на 1 ГГц составила 9,2–25, а тангенс потерь — 0,007–0,012. Максимальное значение $\epsilon = 25$ и $\tan \delta = 0,007$ зафиксировано на образце с 70% BaTiO_3 . Рентгенофазовый анализ выявил, что в данном образце содержится 74,6 вес. % фазы фресноита. Параметры элементарной ячейки $\text{Ba}_2\text{TiSi}_2\text{O}_8$: $a = 8,498 \text{ \AA}$, $c = 5,208 \text{ \AA}$, $V = 376,12 \text{ \AA}^3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках темы № 102403070034-2-1.4.3 и государственного задания филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС (№ 1024030700042-1-1.4.3).

1. Погосян М.А., Саргсян М.С., Алексанян О.А. Синтез и исследование свойств композитов титаната бария со стеклом системы $\text{BaO-TiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3$ // Chemical Journal of Armenia. 2022. P. 283 – 293.
2. Дятлова Е.М., Шамкалович В.И., Миненкова Г.Я., Протасевич Г.И. Синтез и исследование композиционных материалов на основе легкоплавкого свинцово-силикатного стекла и конденсаторной керамики // Стекло, ситаллы и силикаты: республиканский межведомственный сборник. Минск: Вышэйшая школа. 1978. Вып. 7. С. 117 – 123.
3. Brewer S.J., Deng C.Z., Ca Llaway C.P., et al. Effect of top electrode material on radiation-induced degradation of ferroelectric thin film structures // Journal of Applied Physics. 2016. V. 120. №. 2. P. 024101.

Гибридные органо-неорганические материалы для поглощения и детектирования токсичных веществ при пожарах и чрезвычайных ситуациях

П.Ю. Шабалина

E-mail: polina_2593@mail.ru

Санкт-Петербургский университет Государственной противопожарной службы МЧС России им. Героя Российской Федерации генерала армии Е.Н. Зиничева, Санкт-Петербург, Россия

Пожары и техногенные аварии сопровождаются выбросом высокотоксичных газов (СО, HCN, NO_x, летучие органические соединения), причём именно ингаляционное отравление, а не ожоги, становится причиной более 80 % летальных исходов. Для минимизации комбинированного химического поражения необходимо объединить сорбцию токсикантов и их оперативное обнаружение [1–4]. Мы предлагаем пористые гибридные материалы на основе металлоорганических каркасов (MOF) и углеродных наноструктур, способные одновременно поглощать опасные газы и служить активными слоями сенсоров.

Синтез MOF-гибридов проводился солвотермальным методом с последующей интеркалиацией наночастиц CuO/MnO₂, катализирующих окисление СО до СО₂ [5]. Поверхность пор функционализировали –CN-группами, что повысило сродство к HCN почти в два раза [6]. Композиты депонировали тонкой плёнкой на подложки SnO₂ и MoS₂, получая прототипы газочувствительных элементов.

Сорбционная ёмкость образцов для СО достигала 5,1 ммоль/г при 298 К; для HCN — 3,4 ммоль/г. При температуре 200 °С (типичной для коридора, заполненного дымом) сенсорный ответ ($S = R_s/R_a$) составлял ~35 для 100 ppm СО и до 60 для 50 ppm HCN. Время отклика не превышало 8 с, а рекуперация происходила за <60 с при продувке воздухом. Проведённые термогравиметрические испытания подтвердили, что гибриды сохраняют структуру до ≥350 °С, что критически важно для применения в фильтрующих кассетах и датчиках пожаро-сигнализационных систем.

Полученные данные показывают, что сочетание каталитической активности CuO/MnO₂ и селективности –CN-функционализированных MOF обеспечивает как быструю детоксикацию СО, так и селективное связывание HCN. Материалы могут служить активным слоем в одноразовых фильтрующих капюшонах, продлевая их ресурс, а также в портативных газоанализаторах, интегрируемых в системы раннего оповещения. Дополнительное покрытие нанокомпозитами внутренних стенок воздухопроводов систем противодымной вентиляции способно уменьшить пиковые концентрации токсикантов во время эвакуации.

Разработанные гибридные органо-неорганические материалы совмещают функции поглотителей и сенсоров токсичных газов. Их высокая термостабильность, сорбционная ёмкость и чувствительность делают их перспективными для средств индивидуальной защиты, фильтрующих кассет пожарных респираторов и автоматизированных систем мониторинга.

1. Martinez-Ahumada E., Diaz-Ramirez M.L., Velasquez-Hernandez M.J. Capture of toxic gases in MOFs: SO₂, H₂S, NH₃ and NO_x // Chem. Sci. 2021. Т. 12. С. 6772–6799.
2. Рыльникова Г.Ю. Использование углеграфитовых материалов в качестве адсорбентов токсичных веществ, образующихся при чрезвычайных ситуациях // Науч.-обр. пробл. гражд. защиты. 2016. № 3(30). С. 125–132.
3. Ahmad K., Oh T.-H. Recent progress in MOF-derived materials for gas sensing applications // Chemosensors. 2025. Т. 13, № 3. Art. 100.
4. ГОСТ 12.1.007-76. Воздух рабочей зоны. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности. М.: Стандартинформ, 2017. 29 с.
5. Хусаинов И.А., Гараев Р.Р., Сафин Д.М. Каталитическое окисление СО на CuO/MnO₂-содержащих MOF-сорбентах // Журн. неорган. химии. 2023. Т. 68, № 9. С. 1500–1506.
6. Wang J., Li Z., Zhang X. Cyanide-functionalized metal–organic frameworks for highly selective adsorption of hydrogen cyanide // Adv. Mater. 2024. Vol. 36. P. 2401123.

Новые люминофоры $Y_2(SO_4)_3:Eu^{3+}$ с термическим анти-тушением люминесценции**О.Ю. Шорец^{1,2}, А.П. Шаблинский^{1,2}**

E-mail: olga_frooze@rambler.ru

¹Филиал НИЦ «Курчатовский институт» ПИЯФ - ИХС, Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия

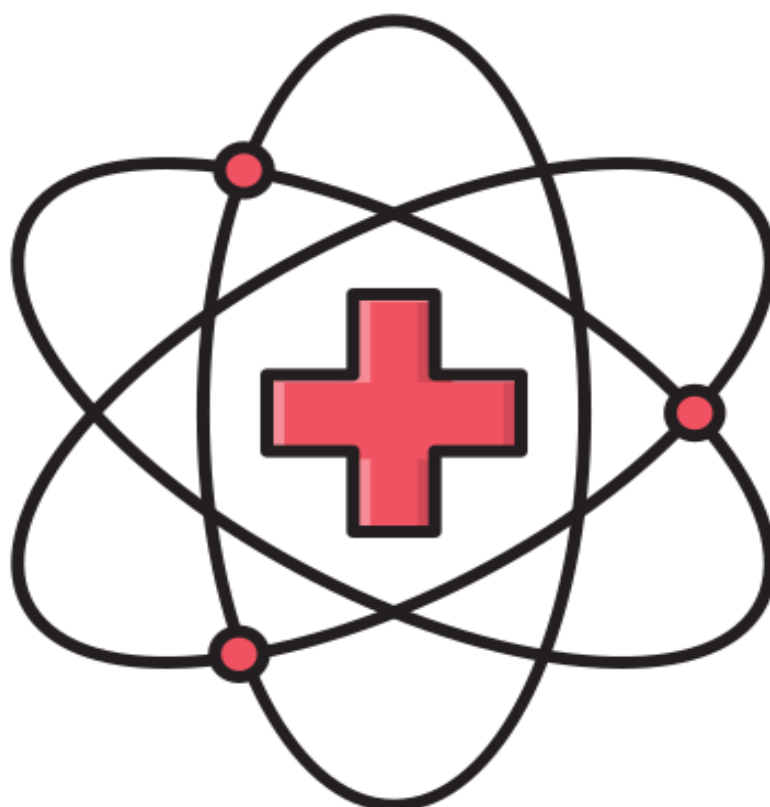
Новые уникальные люминофоры $(Y_{1-x}Eu_x)_2(SO_4)_3$ ($x = 0, 0.17, 0.33, 0.5, 0.66$) с термическим анти-тушением люминесценции из-за гигантского отрицательного термического расширения получены путем кристаллизации из водных растворов. Кристаллическая структура $Y_2(SO_4)_3$ описывается как каркас, состоящий из тетраэдров SO_4 и октаэдров YO_6 , объединенных через общие вершины [1]. Термическое расширение сульфатов с $x = 0, 0.17, 0.5$ было исследовано методом порошковой терморентгенографии. Кристаллическая структура твердого раствора $x = 0.5$ уточнена методом Ритвельда при 400 и 500 °С до $RB = 1.7$ и 1.9%. Установлено, что незначительное смещение тетраэдров SO_4 приводит к гигантскому отрицательному объемному термическому расширению: структура сжимается во всех направлениях ($\alpha_a = -7(3)$, $\alpha_b = -15(3)$, $\alpha_c = -22(2)$, $\alpha_v = -44(2) \cdot 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ при 500 °С для $YEu(SO_4)_3$) [2].

Интенсивность фотолюминесценции увеличивается в 1.8 раза с ростом температуры до 500 °С. Термическое анти-тушение люминесценции Eu^{3+} можно описать в терминах термически усиленного переноса энергии между ионами Eu^{3+} из-за отрицательного термического расширения матрицы $Y_2(SO_4)_3$ во всех неэквивалентных направлениях.

Работа выполнена за счет гранта Российского Научного Фонда № 22-13-00317-П.

1. Wickleder M.S. Wasserfreie Sulfate der Selten-Erd-Elemente: Synthese und Kristallstruktur von $Y_2(SO_4)_3$ und $Sc_2(SO_4)_3$ // Z. fuer Anorg. Allg. Chem. 2000. V. 626. P. 1468–1472.
2. Shablinskii A.P., Shorets O.Y., Povotskiy A.V., Bubnova R.S., Krzhizhanovskaya M.G., Janson S.Y., Ugolkov V.L., Filatov S.K. Novel $Y_2(SO_4)_3:Eu^{3+}$ Phosphors with Anti-Thermal Quenching of Luminescence Due to Giant Negative Thermal Expansion // Crystals. 2024. V. 14. 1074.

Ядерная медицина



Плазменные технологии в структуре радиотерапевтической помощи: новый инструмент для повышения доступности и эффективности лечения

В.В. Андилахай, А.В. Королев

E-mail: nio-vmeda@mil.ru

Федеральное государственное бюджетное военное образовательное учреждение высшего образования „Военно-медицинская академия имени С. М. Кирова“ Министерства обороны Российской Федерации, Санкт-Петербург, Россия

Увеличение средней продолжительности жизни, а также широты охвата и качества молекулярно-генетических исследований ведет к ежегодному приросту числа лиц, страдающих злокачественными новообразованиями. Так, по данным за 2023 год, прирост заболеваемости составил 1,4% (642 724 новых случая), примерно 60% из этого числа потребовалось проведение курса радиотерапии (около 385 634 человек). Однако объем оказания данного вида помощи оценивается всего в 40% от общей потребности. Таким образом, официальная статистика констатирует наличие значительного дефицита и неполное покрытие потребности радиотерапевтической помощи на территории России.

Проблема дефицита радиотерапевтической помощи является комплексной, но ключевым аспектом является высокая доля используемого иностранного оборудования. Последнее создает множественные сложности с его диагностикой, поверкой и техническим обслуживанием, что особенно остро проявляется в сложившихся условиях санкционных ограничений. Разработка и внедрение отечественных плазменных технологий позволяет отказаться от импорта дорогостоящего клинического оборудования и наладить производство установок, способных решать широкий спектр клинических задач благодаря своим конструкционным особенностям.

К таким технологиям можно отнести разрабатываемые в стенах НИО МБИ НИЦ ВМедА МНИГ "Радиационных (плазменных) технологий": методику обработки биологических тканей струей холодной плазмы и форвакуумные плазменные источники электронов, конструкционные принципы которых позволяют уменьшить лучевую нагрузку на персонал и перейти к более широкому применению метода интраоперационной лучевой терапии [1].

Адьювантная и неоадьювантная терапия с применением холодной атмосферной плазмы представляет собой инновационный подход в комплексном лечении новообразований головы и шеи, а также опухолей желудочно-кишечного тракта [2]. Ключевыми преимуществами данной технологии являются: простота конструкции плазмотрона и низкие требования к параметрам источника питания. Это открывает возможности для ее использования в качестве малоинвазивной процедуры путем интеграции плазмотрона в лапароскоп или применения более мощных установок при полостных операциях. Данный метод способен существенно снизить риск рецидивов после органосохраняющих операций и уменьшить вероятность развития канцероматоза брюшины.

Таким образом, внедрение плазменных технологий способно улучшить качество и степень оказания радиотерапевтической помощи. А развитие данных технологий призвано обеспечить техническую независимость от иностранных производителей и повысить обеспеченность профильных отделений отечественным оборудованием.

1. Королев А.В., Евсеева П.В., Слизов П.А. К вопросу применения форвакуумных плазменных источников электронов в интраоперационной лучевой терапии // Актуальные вопросы экспериментальной и клинической медицины - 2025: тез. докл. LXXXVI итоговой науч.-практ. конф. студентов и молодых ученых. СПб., 2025. С. 203.
2. Li X., Rui X., Li D., Wang Y., Tan F. Plasma oncology: Adjuvant therapy for head and neck cancer using cold atmospheric plasma // *Frontiers in Oncology*. 2022. Vol. 12. Article 994172. DOI: 10.3389/fonc.2022.994172.

Возможности материальной декомпозиции *in vivo* методом двухэнергетической компьютерной томографии

А.А. Бекетова, Я.Д. Хлыбова, Ю.М. Подсумкова, М.М. Гребенюк, К.П. Дроботов

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный педиатрический медицинский университет» Минздрава России, Санкт-Петербург, Россия

Применяемые в настоящее время методы медицинской визуализации открывают широкие возможности как для получения анатомических изображений, так и для определения химического состава исследуемого объекта. Примером такого метода является МРТ и её модификация — МР-спектроскопия, однако существует новое развивающееся направление — двухэнергетическая компьютерная томография (ДЭКТ).

Различный характер взаимодействия вещества с рентгеновским излучением на разных уровнях энергий обусловлен фотоэффектом и рассеянием Комптона, обеспечивает различную степень поглощения и может быть описан математически [1]. Это, в свою очередь, можно использовать в целях материальной декомпозиции — определения элементного или вещественного состава сложного материала. На сегодняшний день ДЭКТ позволяет получить данные о плотностях НУ на разных уровнях пиковых значений энергий, определить эффективный атомный номер вокселя (Z-эффективное) и ряд других параметров ткани в зависимости от производителя оборудования. Математические алгоритмы позволяют обработать полученные данные и определить качественные и количественные параметры ткани. Несмотря на расширенные диагностические возможности по сравнению с рутинной КТ, ДЭКТ лишь начинает широко вводиться в клиническую практику [2].

Цель данной работы заключается в определении преимуществ материальной декомпозиции *in vivo* методом ДЭКТ.

В ходе работы были проанализированы 27 серий изображений, полученных с помощью томографа с двухслойным детектором Philips IQon Spectral CT 256 slice. К преимуществам данного исследования можно отнести возможность получения диагностически ценной информации без дополнительной лучевой нагрузки, так как в использованном томографе технология ДЭКТ реализуется на уровне детекторов. Материальная декомпозиция позволила определить характер конкрементов поджелудочной железы и мочевыводящей системы, визуализировать и количественно оценить жировые изменения печени, улучшить визуализацию дегенеративных изменений позвоночника.

Таким образом, более широкое внедрение в клиническую практику технологии ДЭКТ и усовершенствование методов анализа получаемых данных может способствовать более детальной диагностике многих заболеваний и состояний.

1. Greffier J. et al. Spectral CT imaging: Technical principles of dual-energy CT and multi-energy photon-counting CT // *Diagn Interv Imaging*. 2023. V. 104. No. 4. P. 167–177.
2. Tivnan P. et al. Utilization of a two-material decomposition from a single-source, dual-energy CT in acute traumatic vertebral fractures// *Frontiers in radiology*. 2023. V. 3. 1187449.

Медицинский протонный Комплекс на базе синхроциклотрона НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

М.И. Мамедова, Ф.А. Пак, Л.Г. Ваганян, А.И. Халиков

E-mail: mamedova_ni@npri.nrcki.ru

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

Описан медицинский протонный Комплекс (МПК), созданный на базе синхроциклотрона СЦ-1000 НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, рассмотрена методика проведения протонной лучевой терапии (ПЛТ) с энергией пучка 1000 МэВ, уделено внимание физико-техническим мероприятиям по обеспечению качества облучения.

ПЛТ с применением пучка, получаемого на СЦ-1000, проводилась с 1975 по 2013 г. и подтвердила свою состоятельность и эффективность при облучении малых глубокозалегающих внутричерепных локализаций [1]. Было проведено 1394 сеанса облучения пациентам с эндоселлярными аденомами гипофиза, артериовенозными мальформациями сосудов головного мозга, а также пациентам, страдающим раком молочной и предстательной железы с костными метастазами с целью купирования болевого синдрома посредством радиационного воздействия на гипофиз.

Главные особенности метода облучения заключаются в следующем.

1. ПЛТ проводится первичным пучком протонов с энергией 1000 МэВ.
2. Облучение проводится «напролет» без выделения максимальной энергии протонов в пике Брэгга на уровне мишени.
3. Глубинное дозное распределение формируется по методике двухосевого плавного ротационного движения элементов установки протонной стереотаксической терапии (УПСТ) относительно стационарного горизонтального пучка.

Метод ПЛТ с энергией пучка 1000 МэВ требует высокой точности и надежности при проведении лечебной процедуры. В связи с этим необходимо выполнять структурированные физико-технические мероприятия по обеспечению качества облучения. Важная роль отводится дозиметрическому планированию и верификации планов облучения.

Оптимальные параметры облучения определяются специализированной системой дозиметрического планирования ProtoPlan. Программное обеспечение было разработано в рамках модернизации МПК, поскольку существующие программные приложения предназначены для ПЛТ с максимальной энергией протонов 250 МэВ с использованием пика Брэгга. В результате дозиметрического планирования в системе ProtoPlan рассчитывается прогнозируемое дозное распределение в области интереса, определяются оптимальные параметры терапевтического пучка и наилучшая конфигурация движения элементов УПСТ в процессе сеанса облучения для достижения поставленных предписаний.

Для верификации рассчитанных дозиметрических планов используются термолюминесцентные детекторы из фтористого лития, размещенные в тканезквивалентном фантоме. Кроме того, был апробирован способ измерения дозных распределений с помощью радиохромных дозиметрических пленок [2]. Сделан вывод, что радиохромные пленки могут быть пригодны для клинической дозиметрии и верификации планов ПЛТ на базе СЦ-1000 в качестве альтернативы или дополнения к методу термолюминесцентной дозиметрии.

1. Гранов А.М. и др. // Медицинская физика. 2016. Т. 70, № 2. С. 10-17.
2. Глухов И.С. и др. // Вестник ДИТИ. 2023. Т. 29, № 1. С. 5-22.

**Оценка летальности мышей линии Balb/c с индуцированной опухолью
аденокарциномы кишечника при однократном введении радиофармацевтического
препарата на основе тербия-161 и моноклональных антител к рецептору stabilin-1**

***Сергеева Е.В.¹, Грачев А.А.¹, Гараева Л.А.¹, Соляник А.М.¹, Ершов А.О.¹, Бурдаков В.С.¹,
Кванчиани В.В.¹, Верлов Н.А.^{1,2}, Штам Т.А.^{1,2}, Коневега А.Л.^{1,2,3}***

E-mail: sergeeva_ev@pnpi.nrcki.ru

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

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

Радиофармацевтические препараты, основанные на моноклональных антителах, представляют собой перспективное направление в терапии злокачественных новообразований за счёт высокой специфичности и возможности адресной доставки радионуклида к опухолевым мишеням [1]. Использование в качестве радионуклида тербия-161, обладающего уникальными радиофизическими характеристиками, позволяет повысить эффективность и избирательность воздействия на опухолевые клетки, особенно при минимальных опухолевых объемах [2]. В связи с этим актуальной задачей на доклиническом этапе исследований становится оценка токсичности и переносимости таких препаратов. В рамках настоящей работы проведено исследование по оценке летальности и эффективности экспериментального радиофармацевтического препарата, представляющего собой радиоиммуноконъюгат моноклональных антител к рецептору stabilin-1, в молекулы которых введены хелатирующие группы DOTA с радионуклидом тербий -161.

Мыши с индуцированными опухолями (СТ-26) были распределены на 7 групп. Животные опытных групп получали тестируемый объект в дозах 2, 3, 10 или 20 МБк. Животные групп контроля получали носитель либо являлись здоровым интактным контролем. Оценку токсического действия проводили в течение 64 дней после введения тестируемого объекта. Начиная с 12-го дня эксперимента наблюдали гибель животных.

Было показано, что однократное внутривенное введение тестируемого объекта в дозах 10 и 20 МБк вызывает выраженную летальность у мышей линии Balb/c с индуцированной опухолью. Введение тестируемого радиофармацевтического препарата животным со сформированной патологией в дозе 2 МБк не продемонстрировало значимых различий по показателю летальность по сравнению с группой патологического контроля, что может свидетельствовать о недостаточной терапевтической эффективности и, соответственно, выраженности опухолевого процесса, превалирующего над возможным действием препарата в данной дозе. Доза 3 МБк продемонстрировала наименьшее токсическое воздействие в сравнении с более высокими изученными дозами и, согласно данным статистической обработки, способствовала увеличению продолжительности жизни самок.

Полученные результаты подчеркивают необходимость дальнейших исследований токсичности ¹⁶¹Tb-содержащих радиофармацевтических препаратов, в том числе уточнения терапевтического окна. Это позволит оценить безопасность и перспективность применения ¹⁶¹Tb в ядерной медицине.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-15-2021-1360) и в рамках ГЗ (регистрационный номер № 121060200125-2).

1. Kuiper, J., Zoetelief, E., Brabander, T., de Herder, W. W., & Hofland, J. (2025). Current status of peptide receptor radionuclide therapy in grade 1 and 2 gastroenteropancreatic neuroendocrine tumours. *Journal of neuroendocrinology*, 37(3), e13469. <https://doi.org/10.1111/jne.13469>
2. Tran, H. H., Yamaguchi, A., & Manning, H. C. (2025). Radiotheranostic landscape: A review of clinical and preclinical development. *European journal of nuclear medicine and molecular imaging*, 52(7), 2685–2709. <https://doi.org/10.1007/s00259-025-07103-7>

Шубина А.В.^{1,2}, Лютова Ж.Б.^{1,2}

E-mail: zhanna.lutova@gmail.com

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

Концентрация ионов железа является критически важным параметром гомеостаза, будучи кофактором широкого спектра фундаментальных биологических процессов [1]. Железо входит в состав функционального фрагмента ключевых белков, а именно гемоглобина, обеспечивающего транспорт кислорода, и цитохромов дыхательной цепи, участвующих в синтезе АТФ, а также является компонентом активных центров таких ферментов, как каталаза, опосредующая детоксикацию, и рибонуклеотид-редуктаза, ответственная за синтез ДНК.

Нарушение регуляции уровня ионов железа в организме сопряжено с развитием серьезных патологических состояний. При избыточной концентрации железо катализирует реакции образования активных форм кислорода, что, в свою очередь, приводит к запуску процесса перекисного окисления липидов и вызывает повреждение клеточных структур. Параллельно повышенная доступность железа создает условия для усиленной пролиферации патогенных микроорганизмов. С другой стороны, дефицит железа ведет к железодефицитной анемии с нарушением кислородного транспорта и клеточного дыхания.

Многофункциональность лактоферрина, ключевого железосвязывающего белка, определяет актуальность исследований его свойств. Помимо центральной роли в регуляции метаболизма железа, лактоферрин обладает выраженной биологической активностью, включая антибактериальную, противогрибковую, противовоспалительную и антиоксидантную функции [2]. Перспективным направлением является также изучение его противоопухолевого потенциала, что открывает возможности для создания новых терапевтических средств, в частности, для применения в ранозаживляющих и противовоспалительных препаратах.

Лактоферрин является термолабильным белком, денатурация которого при термической стерилизации приводит к необратимой потере его биологической активности. В связи с этим, перспективным методом является применение радиационной стерилизации, что и обуславливает цель настоящего исследования — изучение влияния электронно-лучевой обработки на физико-химические свойства данного белка.

Лиофилизат человеческого рекомбинантного лактоферрина, предварительно охарактеризованный методами электрофореза в полиакриламидном геле и масс-спектрометрии, подвергали радиационной обработке дозами до 25 кГр. Для оценки радиационно-индуцированных изменений в молекулярной структуре белка применяли комплекс спектроскопических методов: ИК-Фурье-спектроскопию с преобразованием Фурье и УФ-спектроскопию видимой области.

Результаты спектроскопического анализа демонстрируют сохранение первичной и вторичной структуры белка в результате облучения, что свидетельствует о принципиальной возможности применения электронно-лучевой стерилизации в технологическом цикле производства стерильных препаратов лактоферрина. Однако, для полноценного подтверждения возможность применения радиационной стерилизации требуется оценка биологической активности этого белка после электронно-лучевой обработки.

1. Vega-Bautista A. et al. The impact of Lactoferrin on the growth of intestinal inhabitant bacteria //International journal of molecular sciences. – 2019. – Т. 20. – №. 19. – С. 4707.

Aleshina G.M. Lactoferrin — an endogenous regulator of the protective functions of the organism // Medical academic journal. - 2019. - Vol. 19. - N. 1. - P. 35-44