

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
«ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ ИМ. Б.П. КОНСТАНТИНОВА»  
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА «КУРЧАТОВСКИЙ  
ИНСТИТУТ»**

**СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ  
VI ВСЕРОССИЙСКИЙ МОЛОЖЕДНЫЙ НАУЧНЫЙ ФОРУМ  
«OPENSOURCE 2019»**

Гатчина, Россия

13-15 ноября, 2019

**Редактор:**

Лямкин В.А.

**ОРГАНИЗАТОР**

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

**ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

д-р. биол. наук Саранцева Светлана Владимировна  
канд. техн. наук Максимов Владимир Исаакович  
канд. физ.-мат. наук Борисенкова Алина Александровна

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ  
КОМИТЕТ**

Ниязов Рамиль Асхатович  
Швецона Наталья Юрьевна  
Ильина Юлия Александровна  
Лямкин Виталий Александрович  
Суясова Марина Вадимовна  
Доронин Максим Валерьевич  
Клюшников Георгий Николаевич  
Ниязова Нелли Витальевна  
Каюмов Михаил Юрьевич  
Абрамец Владислава Владимировна  
Шахова Вера Михайловна

## **Пленарные и приглашенные доклады**

## Квантово-химические модели суперосновных сред $\text{MOH}(\text{MOBu}^t)/\text{DMSO}$ в ацетиленовых реакциях, активированных основанием

*Н. М. Витковская*

*Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия*

Промотируемые основаниями реакции ацетилена представляют собой важную область органической химии и чрезвычайно интересны с точки зрения синтеза, теории и коммерческих перспектив. Исследования физических органических свойств и реакционной способности смесей  $\text{KOH}/\text{DMSO}$  выявили необычайно высокую основность ( $pK_a$  30–32). Предполагается, что специфическая сольватация катиона и, следовательно, повышенная активность аниона являются причиной сверхосновности таких систем. Концепция суперосновности в применении к химии ацетилена была впервые сформулирована и систематически разработана в работах Б.А. Трофимова [1, 2]. Анион, образующийся в сверхосновной среде, становится высокоактивным, в частности, по отношению к такой электрофильной группе, как тройная ацетиленовая связь  $\text{C}\equiv\text{C}$ . Изменение свойств среды (растворитель и природа основания) позволяет вовлекать в реакцию многие типы органических соединений и контролировать выходы, селективность и структуру получаемых продуктов. Суспензии гидроксидов и трет-бутоксидов щелочных металлов в диметилсульфоксиде ( $\text{MOH}/\text{DMSO}$ ,  $\text{MOBu}^t/\text{DMSO}$ ;  $M = \text{Na}, \text{K}$ ) являются классическими примерами простых и доступных супероснований. Систематическое использование таких сред оказалось особенно эффективным в ацетиленовых реакциях. Суть этой химии – двойная и гибкая реакционная способность ацетилена, его способность попеременно действовать как электрофил или нуклеофил. Процессы самоорганизации также требуют двойной реакционной способности сореагентов, например кетонов. Эта двойственная функциональность (как ацетилена, так и кетонов) элегантно выражена в сверхосновных средах благодаря десольватации анионов.

В этой работе мы попытались решить вопросы, касающиеся как применимости различных кластерно-континуальных моделей сверхосновных систем  $\text{MOH}(\text{OBut}^t)/\text{DMSO}$ , так и выбора единого метода, способного описывать типичные реакции ацетилена с достаточной точностью.

Нами представлена общая концепция суперосновного ( $\text{MOH}/\text{DMSO}$  и  $\text{MOBu}^t/\text{DMSO}$ ,  $M = \text{Na}, \text{K}$ ) катализа. Согласно этой концепции, реакционный центр представлен недиссоциированной молекулой  $\text{MOH}$  или  $\text{MOBu}^t$  с различными уровнями учета растворителя. Наиболее полное описание реакционного центра включает ближайшую сольватную оболочку: модель пентасольватная (PENTA) для комплексов калия –  $\text{KOH}\cdot 5\text{DMSO}$ ,  $\text{KOBu}^t\cdot 5\text{DMSO}$  и модель тетрасольватная (TETRA) для комплексов натрия  $\text{NaOH}\cdot 4\text{DMSO}$ ,  $\text{NaOBu}^t\cdot 4\text{DMSO}$ . Для комплексов с катионом натрия были определены глобальные минимумы. Использование этих моделей позволило объяснить наблюдаемые экспериментально изменения в природе и составе продуктов взаимодействия ацетона с фенилацетиленом в  $\text{KOH}/\text{DMSO}$ , от образования ацетиленовых спиртов до образования  $\beta,\gamma$ -ненасыщенных кетонов, когда температура реакции варьируется от 0–30°C до 80–100°C, а также дано объяснение наблюдаемого снижения активности O-, S- и C-нуклеофилов при введении воды в сверхосновную систему ( $\text{MOH}(\text{OBu}^t)\cdot n\text{DMSO}\cdot m\text{H}_2\text{O}$ ,  $m=1,2$ ). Низкие активационные барьеры миграции молекулы воды обеспечивают свободный транспорт протона даже к изначально удаленным от неё анионным центрам с образованием конечного продукта и регенерацией суперосновного катализатора. Однако вопрос о природе ускорения реакций ацетилена в присутствии супероснований – катализ или промотирование – для каждой реакции остается открытым.

Пентасольватная модель описания суперосновных систем позволяет определить особенности ключевых процессов с участием сверхосновного реакционного центра, в частности, его гидратации, а также разработать подход к созданию упрощенных моделей для описания превращений в сложных системах. Очевидно, что использование таких детальных моделей, как пентасольватная и тетрасольватная, очень ресурсоемко и может быть приемлемо только для небольших молекулярных систем. Моделирование промотируемых супероснованием винилирования O-, S- и C-нуклеофилов

и этилирования кетонов показывает, что основным акт реакции, то есть присоединение образованной нуклеофильной частицы к субстрату, происходит на периферии реакционной системы. Это обстоятельство дает основание для применения простой анионной модели (ANION), которая пренебрегает наличием удаленного катиона и рассматривает растворитель только как поляризуемый континуум. Легкость перемещения молекулы воды в координационной сфере щелочного металла позволяет нам при использовании анионной модели пренебрегать присутствием молекулы воды на тех этапах описания ППЭ, где эта молекула присутствует в качестве «зрителя», и явно включать ее в расчет при рассмотрении процессов, в которых молекула воды участвует в транспорте протонов. Простейшая анионная модель способна надежно описать барьеры активации и их соотношение на всей последовательности стадий реакции и позволяет оценить их на достаточно высоких уровнях теории. Тем не менее, упрощенная анионная модель не описывает ни образования нуклеофилов, ни различий между сверхосновными системами  $\text{MOH/DMSO}$  и  $\text{MOBu}^+/\text{DMSO}$ . Кроме того, она пренебрегает ролью катиона щелочного металла, природа которого может влиять как на структуру продуктов реакции, так и на скорость превращений. В связи с этим была предложена моносольватная модель ( $\text{MONO}_{\text{GAS}}$ ) с участием недиссоциированной молекулы щелочи и явным включением одной молекулы растворителя в расчет. Моносольватная модель не требует больших вычислительных ресурсов по сравнению с пентасольватной моделью, но демонстрирует специфические эффекты сольватации, прежде всего влияющие на разрыхление связи  $\text{M-OH}$  в исходных гидроксидах и связи  $\text{M-Nu}$  образовавшихся комплексов  $\text{DMSO}\cdot\text{M}^+\text{Nu}^-\cdot\text{H}_2\text{O}$ . Все перечисленные особенности делают моносольватную модель перспективным инструментом для изучения механизмов реакций, проводимых в сверхосновных средах. Однако результаты, полученные с использованием модели  $\text{MONO}_{\text{GAS}}$ , близки к результатам, которые можно воспроизвести в пентасольватной модели, только тогда, когда реагирующие частицы располагаются таким же образом, как в случае пяти молекул DMSO. Это предполагает предварительный выбор необходимой ориентации всех реагентов с полным описанием первой сольватной оболочки катиона, в противном случае моносольватная модель  $\text{MONO}_{\text{GAS}}$  приводит к непредсказуемости и случайности взаимной ориентации реагентов в комплексах. К счастью, оптимизация структуры моносольватного комплекса в растворе DMSO ( $\text{MONO}_{\text{PCM}}$ ) часто создает необходимое окружение реакционного центра и, таким образом, улучшает саму моносольватную модель. Использование моносольватной модели целесообразно в тех случаях, когда учет катиона имеет первостепенное значение. Например, эта модель может быть полезна для оценки влияния природы катиона на эффективность сверхосновной системы. Необходимым условием успешного применения этой модели является оптимизация геометрии с учетом влияния растворителя на уровне PCM.

Использование комбинированного подхода B2PLYP//B3LYP обеспечивает точность, сравнимую с точностью вычислений методом CBS-Q//B3 в анионной модели. Этот подход обеспечивает разумное описание сложных реакций ацетилена с кетонами, оксимами, имидами, аминами, и другими соединениями с кратными связями, приводящих к различным каскадным сборкам карбо- и гетероциклов, таких как фураны, 6,8-диоксабициклооктаны, циклопентенолы, оксазолины, пиразолы и пирролы.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ № 4.1671.2017/4.6 и поддержана грантом РФФИ № 18-03-00573-а*

1. Trofimov B. A. Acetylene and its derivatives in reactions with nucleophiles: recent advances and current trends / B. A. Trofimov // Curr. Org. Chem. – 2002. – V. 6. – P. 1121

2. Trofimov B.A. Acetylenes in the superbases-promoted assembly of carbocycles and hetero-cycles / B.A. Trofimov, E.Y. Schmidt // Acc. Chem. Res. – 2018. – V. 51. – P. 1117-1130

## **Квантовые вычисления: возможности и ограничения**

*А. В. Ланкин*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

Среди задач, решение которых может быть эффективно выполнено с помощью квантового компьютера, особое значение имеет проблема нахождения точного решения уравнения Шредингера [1]. Применение методов первопринципного численного моделирования и современных суперкомпьютерных систем позволяет значительно упростить и расширить возможности поиска новых материалов с заданными свойствами. Однако такие подходы сталкиваются с рядом объективных ограничений, связанных с тем, что поиск точного решения квантово-механической задачи при использовании стандартных алгоритмов, которые представляют задачу в виде последовательности логических операций, имеют экспоненциально большую вычислительную сложность при росте размера рассматриваемой системы [2]. Это существенно ограничивает область применимости таких методов первопринципного моделирования.

Наличие этих принципиальных ограничений создаёт предпосылки для поиска иных подходов к решению квантовых задач. Таким может быть использование квантового компьютера. Показано, что уравнение Шредингера теоретически может быть решено с помощью квантового компьютера [1].

Поскольку квантовый компьютер сам является квантовой системой, то моделирование поведения других квантовых систем представляется наиболее естественной сферой его применения, а данная задача может быть сравнительно легко сформулирована на языке квантового алгоритма. Существует несколько принципиально разных подходов к реализации квантовых симуляторов, которые делятся на две большие группы.

Первая – цифровые симуляторы, реализующие квантовый алгоритм, который может быть представлен с помощью набора квантовых вентилях. Они могут как полностью моделировать эволюцию квантовой системы, что делается в рамках подходов, основанных на алгоритме оценки фазы [3], так и выполнять вычисление отдельных функций, которые не могут быть эффективно вычислены с помощью классического компьютера, в рамках вариационной процедуры, при этом оставшаяся часть этапов вычисляется на классическом компьютере [4].

Вторая – аналоговые симуляторы [5]. В этом случае какой-либо квантовый алгоритм, представленный в виде последовательности квантовых вентилях, его реализующей, не используется. Физически создаётся квантовая система с гамильтонианом, собственные числа которого можно, согласно какой-то процедуре, сопоставить с уровнями энергии моделируемой молекулы. Далее осуществляется измерение энергии её основного или возбуждённых состояний тем или иным образом.

В докладе будут рассмотрены возможности и ограничения каждого из этих типов квантовых вычислительных устройств и рассмотрен вопрос возможности их практической реализации сегодня.

## Периодическая таблица 112+

*А. В. Зайцевский<sup>1,2</sup>, Н. С. Мосягин<sup>1</sup>, А. В. Титов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Представлен обзор основных способов получения атомных ядер с зарядами  $Z=112-118$  и перспективы синтеза ядер с еще более высокими зарядами. Анализируются тенденции в зависимости времен жизни сверхтяжелых ядер от их заряда и числа нейтронов и их объяснение в рамках простых моделей. Детально обсуждаются особенности электронной структуры сверхтяжелых атомов и их соединений и химии соответствующих элементов. Поскольку атомы с  $Z \geq 112$  доступны как единичные, причем на современных установках частота их появления на много порядков меньше скорости распада (режим atom-at-a-time), возможности экспериментального изучения их химических свойств крайне ограничены и до сих пор единственным подходящим для этого методом остается газовая термохроматография. Ближайшие перспективы получения информации об уровнях энергии сверхтяжелых атомов связываются с лазерной резонансно-ионизационной спектроскопией. Важнейшим же источником информации о химии в этой части периодической таблицы остаётся моделирование из первых принципов.

Отличия химических свойств элементов в области  $Z \geq 112$  от свойств их более легких формальных гомологов и характер зависимости этих свойств от  $Z$  в значительной степени обусловлены релятивистскими эффектами. Рассматриваются основные следствия беспрецедентно сильного релятивистского сжатия и стабилизации подоболочек  $s$  и  $p_{1/2}$  и вторичного расширения подоболочек с высокими значениями углового момента. В их числе - размывание оболочечной структуры распределения электронной плотности, приводящее к изменению характера электронных корреляций, появление специфической субпериодической структуры седьмого периода (субпериоды Nh-Fl и Mc-Og, заканчивающиеся относительно инертным элементом). На основании данных моделирования свободных атомов (молекулярных расчетов на текущий момент нет) обсуждается место в периодической таблице последовательности элементов с зарядами ядер 121 и более, иногда рассматриваемой как аналог актинидной последовательности («суперактиниды»).

1. Oganessian Yu. Ts., Utyonkov V. K. // Rep. Prog. Phys. - 2015.- V. 78. - 036301
2. Eliav E., Fritzsche S., Kaldor U.// Nucl. Phys. A. - 2015. - V. 944 - P. 518-550

## Квантово-химическое исследование каскадных основно-каталитических реакций ацетиленов

*В. Б. Орел, А. А. Манжуева, Н. М. Витковская*

*Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия*

Осуществляемые в суперосновных средах типа MOH/DMSO или MOBut/DMSO ( $M = \text{Na}, \text{K}$ ) взаимопревращения кетонов с ацетиленами послужили трамплином для запуска целой серии синтетически значимых каскадных сборок биологически активных карбо- и гетероциклов [1]. В этой работе мы представляем исследование механизмов каскадных сборок циклопентенолов, функционализированных фуранов и некоторых производных фронталина, используя единый теоретический подход  $\text{B2PLYP/6-311+G}^{**}/\text{B3LYP/6-31+G}^*$  с учетом поправки на энергию сольватации в рамках модели PCM.

Общей стадией этих превращений является нуклеофильное присоединение енолят-иона  $\text{R1C(O)CR2H-}$  к тройной связи ацетилена  $\text{HC}\equiv\text{CH}$ , осуществляющееся с активационным барьером  $\otimes\text{G}^\ddagger = 22,5$  ккал/моль ( $\text{R1}=\text{Ph}; \text{R2}=\text{H}$ ). Образующийся по этой реакции  $\beta,\gamma$ -ненасыщенный кетон подвергается 1,3-прототропной изомеризации с образованием  $\alpha,\beta$ -ненасыщенного кетона ( $\otimes\text{G}^\ddagger = 4,0$  ккал/моль,  $\otimes\text{H} = -29,6$  ккал/моль). На следующей стадии реакции между имеющимися в суперосновной среде этинид- и енолят-ионом возникает конкуренция за нуклеофильное присоединение к связи  $\text{C}=\text{C}$   $\alpha,\beta$ -ненасыщенного кетона  $\text{R1C(O)CR2=CHCH3}$ . В случае  $\text{R1}=\text{Ph}$  и  $\text{R2}=\text{H}$ , активационный барьер присоединения енолят-иона оказывается на 1,7 ккал/моль ниже барьера присоединения  $\text{HC}\equiv\text{C-}$ , и реакция завершается образованием 1,5-дикетона. В случае, когда  $\text{R1}=\text{Mes}$  этинид-ион оказывается активнее, его присоединение связано с меньшей на 3,1 ккал/моль энергией активации. В результате этой реакции образуется ацетиленовый енолят-ион  $\text{R1C(O)CR2-}-\text{C}(\text{CH3})\text{C}\equiv\text{CH}$ , далее претерпевающий внутримолекулярное О-винилирование с образованием фурана ( $\otimes\text{G}^\ddagger = 23,6$  ккал/моль,  $\otimes\text{H} = -82,5$  ккал/моль).

В случае кетонов с объемными заместителями,  $\text{R1}=\text{Mes}$ ,  $\text{R2}=\text{H}$  и  $\text{R1}=\text{Ph}$ ,  $\text{R2}=\text{Bn}$ , термодинамически выгодно оказывается только образование фуранов ( $G = -29,7$  ккал/моль и  $\otimes\text{G} = -33,8$  ккал/моль). Образование 6,8-диоксибицикло[3.2.1]октанов (DOBCO) из 1,5-дикетона и ацетилена в обоих случаях приводит к повышению свободной энергии системы ( $\otimes\text{G} = 10,0$  ккал/моль и  $\otimes\text{G} = 2,0$  ккал/моль).

Наряду с возможным в случае  $\text{R1}=\text{Ph}$  и  $\text{R2}=\text{H}$  образованием DOBCO в ходе О-винилирования промежуточного ацетиленового алкоголята (продукта этинирования 1,5-дикетона ацетиленом), может осуществляться изомеризация алкоголята в ацетиленовый енолят-ион с последующим внутримолекулярным С-винилированием и образованием циклопентенола. При  $\text{R1}=\text{Ph}$  и  $\text{R2}=\text{H}$  суммарные барьеры активации при образовании DOBCO и циклопентенола составляют  $\otimes\text{G}^\ddagger = 15,9$  ккал/моль и  $\otimes\text{G}^\ddagger = 18,2$  ккал/моль, соответственно. Действительно, в этом случае образуется до 86% DOBCO, в то время как аналогичная реакция 1-(тиофен-2-ил)этанона ( $\text{R1}=\text{Th}$ ,  $\text{R2}=\text{H}$ ) приводит к 55% соответствующего циклопентенола [1]. Это согласуется с энергиями активации на пути образования DOBCO ( $\otimes\text{G}^\ddagger = 19,1$  ккал/моль) и циклопентенола ( $\otimes\text{G}^\ddagger = 17,8$  ккал/моль).

Показано, что в случае реакции с алкиларилкетонами образование единственного диастереомера DOBCO обусловлено диастереоселективностью стадии внутримолекулярного О-винилирования полукетала. Для реакции с циклогексаноном наблюдение смеси изомеров [2] обусловлено близкой относительной термодинамической устойчивостью трех изомеров полукетала.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (№19-73-00033).*

1. Trofimov B.A. Acetylenes in the superbases-promoted assembly of carbocycles and hetero-cycles / B.A. Trofimov, E.Y.Schmidt // *Acc. Chem. Res.* – 2018. – V. 51. – P. 1117-1130
2. Polycyclic bridgehead acetals with enol functionality: one-pot assembly from aliphatic ketones and acetylene in KOH/DMSO suspension / E.Y.Schmidt, I.A.Bidusenko, N.A.Chirimichkina, et al. // *Tetrahedron.* – 2016. – V.72. – P. 4510–4517

## **Физика атомного ядра и частиц**

## Компьютерное моделирование газоразрядных детекторов частиц в программе Geant4

*Т. А. Гвелесиани, Д. С. Ильин, Д. А. Майсузенко, А. А. Фетисов*

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

Geant4 – это программный инструмент для детального моделирования взаимодействия элементарных частиц с веществом. Эта программа была разработана в CERN [1] для симуляции работы крупномасштабных детекторов, оптимизации элементов конструкции и защиты от излучения на стадии проектирования физических установок. Программа обладает богатым функционалом и позволяет анализировать генерируемые события по ряду критериев, находить оптимальные алгоритмы отбора исследуемых событий до проведения эксперимента [2]. Принцип работы программы основан на методе Монте-Карло, в рамках которого выполняется анализ с использованием моделей возможных результатов. В процессе моделирования значения некоторой физической величины выбираются случайным образом из исходных распределений вероятности [3].

В настоящее время в НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ выполняется работа по созданию новых газоразрядных камер в рамках нескольких проектов. Одно из направлений включает в себя создание детекторной системы PAS (Proton Arm Spectrometer) [4] для определения импульсов испарительных протонов с энергией до  $E_p=700$  МэВ при сотрудничестве с Институтом тяжелых ионов (Дармштадт, Германия). В программе Geant4 был смоделирован процесс взаимодействия протонов с материалами детектора, рассчитаны рабочие параметры детектора, получены энергетические и пространственные распределения для первичных (протонов) и вторичных частиц (электронов, гамма-квантов).

Детекторная система PAS находится в вакууме и состоит из четырех субдетекторов - регистрирующих плоскостей (X1, X2, Y1, Y2), каждая из которых состоит из трех слоев тонкостенных пропорциональных счетчиков.

В задаче моделирования рассматривались в качестве материала трубок каптон, майлар и алюминий, применяемых для создания тонкостенных пропорциональных и дрейфовых трубок. Анализ ионизационных потерь протонов при прохождении через рабочий объем детектора показал, что каптон и майлар практически идентичны по своим характеристикам. При заданных параметрах детектора в этих материалах суммарные потери энергии протонов с начальной энергией  $E_p=700$  МэВ не превышают  $5 \cdot 10^{-3}\%$ , и  $3 \cdot 10^{-2}\%$  в трубках, выполненных из алюминия.

Показано, что первая плоскость X1, как наиболее критичная для задачи восстановления треков протонов, должна быть изготовлена из майлара или каптона. Для изготовления трубок для плоскостей X2, Y1 и Y2 возможно использовать тонкостенный алюминий при сохранении заданной точности восстановления координат треков протонов.

1. Geant4. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.geant4.org> (дата обращения: 23.09.2019).
2. Андросенко А.А., Андросенко П.А., Артамонов С.Н. Моделирование методом Монте-Карло процесса переноса нейтронов, фотонов и заряженных частиц — препринт ФЭИ, Обнинск, 1991. — 12 с.
3. Андросенко П.А., Блыскавка А. А. Шимкевич И.Ю., Метод Монте-Карло для задач определения характеристик источников излучения по результатам экспериментальных измерений — препринт ФЭИ, Обнинск, 1994. — 28 с.
4. Technical Report for the Design, Construction and Commissioning of the Tracking Detectors for R 3B, November 2014. — 142 с.

## Поиск низкоэнергетических нейтрино от астрофизических источников при помощи детектора Borexino

*И. С. Драчев от лица коллаборации Borexino (M. Agostini et al.)*

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

Borexino [1] — сцинтилляционный нейтринный детектор с массой сцинтиллятора в 1250 тонн, размещённый в подземной лаборатории Гран Сассо (LNGS). Данный детектор демонстрирует непревзойдённый уровень радиочистоты сцинтиллятора в чувствительном объёме и позволяет выполнять измерения потоков солнечных нейтрино [2], а также производить поиск нейтрино от различных астрофизических источников.

В данной работе [3] рассмотрены результаты изучения нейтрино и антинейтрино от астрофизических источников. Электронные антинейтрино регистрировались посредством реакции обратного бета-распада (IBD), в то время как нейтрино — засчёт упругого рассеяния на электронах. Получены модельно-независимые ограничения на поток нейтрино от неизвестных источников в диапазоне 1.8 - 16.8 МэВ, которые в среднем в 2.5 раза лучше предшествующих ограничений. На основе тех же данных были получены ограничения на поток диффузных нейтрино от взрывов сверхновых в ранее неисследованном диапазоне ниже 8 МэВ.

Произведён поиск присутствия антинейтрино в солнечном спектре, что являлось бы свидетельством наличия у нейтрино аномального магнитного момента, делающего возможным его конверсию в магнитном поле Солнца. Получено ограничение в  $384 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ , что для неискаженного спектра нейтрино от распада  ${}^8\text{B}$  соответствует вероятности перехода  $p(\nu_e \rightarrow \bar{\nu}_e) < 7.2 \times 10^{-5}$  (90% C.L.) для антинейтрино с энергией менее 1.8 МэВ. На более низких энергиях посредством исследования формы спектра упругого рассеяния солнечных нейтрино было получено ограничение на вероятность конверсии  $p(\nu_e \rightarrow \bar{\nu}_e) < 0.14$  (90% C.L.) для линии  ${}^7\text{Be}$  с энергией 862 кэВ.

Также были исследованы солнечные вспышки как возможный источник нейтрино. В результате получены лучшие ограничения на нейтринную светимость солнечных вспышек для энергий ниже 3 МэВ. В предположении пропорциональности нейтринной светимости интенсивности вспышки была исключена причина аномального увеличения скорости счета нейтрино в серии 117 Cl-Ag эксперимента в лаборатории Homestake, связывавшаяся с интенсивной солнечной вспышкой.

1. The Borexino detector at the Laboratori Nazionali del Gran Sasso //NIM A ,Т. 600, №3, С. 568-593.

2. Agostini M. et al. Comprehensive measurement of pp-chain solar neutrinos //Nature. – 2018. – Т. 562. – №. 7728. – С. 505-510.

3. Search for low-energy neutrinos from astrophysical sources with Borexino // arXiv:1909.02422

## Исследование мюонного захвата в изотопах $^{82}\text{Kr}$ , $^{130}\text{Xe}$ и $^{100}\text{Mo}$

*Д. Р. Зинатулина, В. Б. Бруданин, И. В. Житников, С. В. Казарцев, Н. С. Румянцева,  
Е. А. Шевчик, М. В. Ширченко*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Во многих задачах требуется знать структуру возбужденных уровней ядер. В частности, это необходимо при расчетах ядерных матричных элементов (ЯМЭ) двойного бета-распада. Для проверки различных моделей специалистам по таким расчетам нужны экспериментальные данные о силовых функциях переходов на эти состояния. Наряду с зарядово-обменными реакциями мюонный захват предоставляет такую возможность [1].

Данные исследования проводятся на пучке отрицательных мюонов мезонной фабрики в Институте Пауля Шеррера (г. Филлиген, Швейцария). В основе идеи эксперимента лежит прецизионное измерение временных и энергетических распределений гамма-лучей, получаемых в результате мюонного захвата в представленных изотопически обогащенных мишенях. Измерения осуществляются с помощью германиевых детекторов, имеющих очень хорошее энергетическое разрешение. Такое разрешение позволяет идентифицировать конкретные изучаемые переходы, заселяющие конкретные состояния дочерних ядер [2]. Данные об интенсивностях таких переходов используется для получения полных и парциальных скоростей мюонного захвата и продуктов этой реакции в изотопах  $^{82}\text{Kr}$ ,  $^{130}\text{Xe}$  и  $^{100}\text{Mo}$ . Именно эта информация необходима для оценки и корректировки модельных расчетов ЯМЭ.

Побочным результатом данного проекта является получение мезорентгеновских спектров излучения, которые служат для идентификации состава вещества и окружающего фона, что безусловно необходимо при поведении экспериментов на мюонных пучках [3].

*Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00383.*

1. Suhonen J., Civitarese O. Weak-interaction and nuclear structure aspects of nuclear double beta decay// Physics Reports. 1998 Vol. 300(3). P. 123-214

2. Zinatulina D., Brudanin V., Egorov V. et.al. Ordinary muon capture studies for the matrix elements in  $\beta/\beta$  decay// Phys.Rev.C. 2019. Vol.99 P.024327

3. Зинатулина Д.Р. Электронный каталог мезорентгеновских спектров излучения // Ядерная Физика 2019. Vol. 82 (3). P. 228.

## Активационный анализ на нейтронных источниках ЛНФ ОИЯИ

Г. К. Канагатова<sup>1</sup>, С. Б. Борзаков<sup>1,2</sup>, К. Храмко<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Университет «Дубна», Дубна, Россия

<sup>2</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

После открытия атомной энергии и создания атомных реакторов и других источников нейтронов возник и развивается метод нейтронно-активационный анализа, обладающий высокой чувствительностью, что позволяет определить практически все имеющееся в природе элементы. Облучение тепловыми нейтронами в реакторах становится ведущим методом НАА активационного анализа. Однако вклад в активацию резонансных нейтронов также значителен.

Исследования методом НАА широко ведутся на установках ЛНФ ОИЯИ - ИРЕН и ИБР-2. Эти источники нейтронов характеризуются большим вкладом резонансных нейтронов (с энергией  $E_n > 0,5 \text{ эВ}$ ). Плотность потока резонансных нейтронов зависит от энергии нейтронов следующим образом:

$$\phi(E_n) = \frac{\Phi_{res1}}{E_n^{1-\alpha}}$$

где  $\alpha = 0.05 - 0.1$ ,  $\Phi_{res1}$  - величина плотности потока нейтронов при 1 эВ.

Поэтому для наших исследований необходимо более точное определение резонансных интегралов, учитывающего реальную зависимость плотности потока нейтронов от энергии, температуру и толщину образца.

В качестве интегральной характеристики взаимодействия резонансных нейтронов с различными изотопами используется величина резонансного интеграла:

$$J_{res0} = \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma_{ny}(E) \frac{dE}{E}$$

где  $\sigma_{ny}(E)$  – сечение радиационного захвата,  $E_{Cd}$  – кадмиевая граница, примерно равная 0.5 эВ.

Эффективные резонансные интегралы отличаются от значений, приведенных в справочнике [1], поскольку в них не учитывается реальная зависимость плотности потока от энергии и поглощение нейтронов в образце.

Эффективный резонансный интеграл равен сумме вкладов от отдельных резонансов и интегралу от части сечения, следующей закону  $1/v$ .

$$I_{eff.res} = I_v(\alpha) + \frac{\pi}{2} \sum \frac{\sigma_{oi} G_i}{E_{ri}^{1-\alpha}} \Gamma_{\gamma i}$$

где  $G_i$ - фактор самопоглощения [2], эти факторы рассчитываются для каждого резонанса в отдельности. Параметры резонансов взяты из [3].

Была создана программа для вычисления эффективных резонансных интегралов, учитывающая реальную зависимость плотности потока от энергии, температуру и толщину образца. С помощью этой программы были вычислены эффективные резонансные интегралы для  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{95}\text{Zr}$ ,  $^{63}\text{Cu}$ , и полученные результаты сравнивались значениями из справочника. Эти результаты применялись для более точного определения плотности потока нейтронов на установках ИБР-2 и ИРЕН.

1. Т.С. Беланова и др., Радиационный захват нейтронов: Справочник, М.: Энергоатомиздат, 1986.
2. G.M. Roe, The Absorption of Neutron in Doppler Broadened Resonances, KAPL-1241, 1954.
3. S.I. Sukhoruchkin et al., Tables of Neutron Resonance Parameters, Landolt-Bornstein, Num. Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group I, V. 16, subvolume B, ed. H. Schopper, Springer, 1998.

## Монте-Карло генератор RegGen для симуляции процессов рождения нейтральных мезонов

*Е. С. Кондратюк, С. В. Евдокимов, С. А. Садовский, А. А. Шангараев*

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

В данной работе представлен Монте-Карло генератор RegGen, основанный на модели Редже для симуляции процессов рождения нейтральных мезонов. Генератор позволяет реалистично воспроизводить их рождение при средних энергиях ( $\sqrt{s} \approx 3-4$  ГэВ). Он используется в методе параметрического анфолдинга для точного измерения массы и ширины нейтральных мезонов [1], который требует точного воспроизведения кинематических распределений процессов. В докладе приведены описание генератора и модели, а также полученные результаты симуляции рождения  $\omega(782)$ -мезона и изучена возможность использования данного генератора для прецизионного измерения массы и ширины указанного мезона с помощью метода параметрического анфолдинга в эксперименте ГИПЕРОН-М [2].

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-32-00266.*

1. Кондратюк Е.С. Измерение массы и ширины  $\omega(782)$ -мезона в эксперименте ГИПЕРОН-М на ускорителе У70 // Сборник тезисов V Всероссийского молодёжного научного форума Open Science. – 2018 – С. 114.

2. Шангараев А.А. Параметрический анфолдинг масс и ширин резонансов // Сборник тезисов V Всероссийского молодёжного научного форума Open Science. – 2018 – С. 133.

## Оценка возможных потерь протонов в магнитной ловушке эксперимента по определению времени жизни нейтрона на пучке холодных нейтронов

*А. П. Серебров, Г. Н. Ключников*

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

Результаты измерений времени жизни нейтрона с помощью хранения ультрахолодных нейтронов согласуются между собой, однако имеется расхождение 1% в вероятности распада с результатами пучкового эксперимента (NIST, США) [1, 2]. Это расхождение известно в литературе как «нейтронная аномалия». В настоящей работе рассматривается одна из возможных причин «нейтронной аномалии». В рамках поставленной цели выполнено математическое моделирование динамики протонов магнитной ловушки, образующихся при бета-распаде нейтронов, в эксперименте NIST. Воспроизведение геометрии электромагнитной системы эксперимента позволило вычислить электрическое поле в распадном объёме. Далее был выполнен расчёт траекторий протонов, соответствующих различным начальным данным. Учитывалось возможное рассеяние протонов на атомах водорода, находящихся в вакууме ловушки. В результате работы получена оценка возможных потерь протонов в магнитной ловушке эксперимента NIST по определению времени жизни нейтрона на пучке холодных нейтронов.

1. J. S. Nico, M. S. Dewey, et al. Measurement of the neutron lifetime by counting trapped protons in a cold neutron beam // *Phys. Rev. C.* 71, 055502 (2005).

2. Разногласие в измерениях времени жизни нейтрона между методом хранения ультрахолодных нейтронов и пучковым экспериментом /А. П. Серебров // *УФН.* 2019. Т. 189. Вып. 9. С. 635-641.

## Разработка высоковольтной системы для ионизационной камеры. Эксперимент по прецизионному измерению радиуса протона

*В. Е. Ларионов*

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

Согласно данным комиссии CODATA[1][2], которая отслеживает результаты измерений фундаментальных констант, зарядовый радиус протона составляет 0,875175(51) фм. Эта величина измеряется экспериментально двумя способами. Первый – измерение дифференциального сечения рассеяния электронов на протоне. Второй – сверхточная спектроскопия электронных переходов в атоме водорода. В 2010 году в Paul Scherrer Institute (PSI) были получены результаты измерения зарядового радиуса, которые проводились на мюонных атомах водорода, в которых электроны были заменены на мюоны. Полученное значение радиуса – 0,84087(39) фм – отличается от измеренного ранее на четыре процента. Так возникла «загадка радиуса протона», которая вызвала беспрецедентный ажиотаж среди ученых.

Эксперимент «Proton» должен поставить точку в этом вопросе. В данном эксперименте используется методика вычисления зарядового радиуса протона за счёт измерения дифференциального сечения упругого рассеяния электронов с беспрецедентной точностью 0.2%. Одним из критических параметров для эксперимента является интенсивность электронного пучка, попадающего в детектор. Для контроля параметров пучка будет использоваться ионизационная камера в токовом режиме.

Конструкция ионизационной камеры представляет собой две обкладки, одна из которых находится под высоким напряжением, помещённые в объём, наполненный аргоном. Пучок электронов, пролетая через камеру, ионизирует аргон между обкладок. В дальнейшем за счёт электрического поля образованные ионы и электроны разделяются и возникает ток между обкладок. Измеренный в камере ток, таким образом, пропорционален интенсивности исходного электронного пучка.

В процессе работы проведено сравнение нескольких вариантов конструкции электродов ионизационной камеры: плоские, цилиндрические, швеллер. Для сравнения параметров электродов производилось моделирование высоковольтной системы в программе Comsol Multiphysics [3]. После моделирования принято решение использовать конструкцию типа «швеллер». Электроды в форме швеллера имеют минимальные токи утечки, обладают самым однородным, из всех представленных конструкций электродов, электрическим полем в рабочем объеме токового монитора. Помимо этого, швеллер является самой жесткой конструкцией из всех перечисленных и таким образом полностью исчезает проблема провисания электродов, при этом они просты при изготовлении и монтаже.

1. Mohr et al., Rev. Mod. Phys. 84, 1527 (2012)
2. Mohr et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 41043109 (2012)
3. Thin Low Permittivity Gap Comparison. <https://www.comsol.com/model/thin-lowpermittivity-gap-comparison-12651>

## Исследование различных геометрий жидкого сцинтилляционного детектора для поиска стерильного нейтрино от источника Се-Pr методом Монте-Карло

*А. В. Дербин, И. С. Драчев, И. С. Ломская, В. Н. Муратова, Н. В. Ниязова, Д. А. Семенов, Е. В. Унжаков*

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

В начале 21 века возникла новая проблема, сначала в ускорительных, а затем в реакторных экспериментах, связанная с измеренной скоростью счета нейтринных событий [1]. На малых расстояниях наблюдался дефицит нейтрино, хотя статистическая значимость этого дефицита была относительно мала. Одним из возможных объяснений этого явления может быть существование еще одного собственного состояния нейтрино с массой около 1 эВ. В этом случае дефицит нейтрино на малых расстояниях был бы объяснен осцилляцией в это состояние. Такое состояние должно быть стерильным, поскольку согласно эксперименту по измерению ширины распада  $Z$ -бозона [2] должны существовать только три нейтринных аромата.

Реакторный эксперимент выглядит естественным путем для такого исследования, но было бы сложно контролировать систематику связанную с ядерным реактором. Эксперимент с использованием радиохимического источника нейтрино произвел бы более надежные результаты, несмотря на меньшую экспериментальную статистику. Следовательно, имеет смысл выполнять поиски стерильного нейтрино с источником параллельно с реакторными экспериментами.

В данной работе [3] мы изучаем возможность поиска стерильного нейтрино с источником антинейтрино  $^{144}\text{Ce} \rightarrow ^{144}\text{Pr}$ , который является многообещающим в связи с высокой граничной энергией бета-перехода на основное состояние в  $^{144}\text{Nd}$  и возможностью сильного снижения фона за счет совпадений в реакции обратного бета-распада в жидком сцинтилляторе. Вычисления производились методом Монте-Карло с использованием ПО GEANT4.10 с целью поиска осцилляций нейтрино в стерильное собственное состояние с массой около 1 эВ. Были получены ожидаемые энергетические спектры в жидкостном сцинтилляционном детекторе большого объема для обратного бета-распада вызванного антинейтрино от источника  $^{144}\text{Ce} \rightarrow ^{144}\text{Pr}$ . Был произведен анализ кривых чувствительности к осцилляционным параметрам для различных геометрий детектора.

1. Review of reactor neutrino oscillation experiments / C. Mariani // Modern Physics Letters A. - Vol. 27, №8. - 2012. - P. 4-8.

2. Lanev A. V. CMS results: Higgs boson and search for new physics // Phys. Usp. – 2014. –С. 923–930

3. A. V. Derbin et. al. Monte-Carlo sensitivity study for sterile neutrino search with  $^{144}\text{Ce} \rightarrow ^{144}\text{Pr}$  source and liquid scintillation detectors of various geometries // arXiv:1905.06670

## Проект источника ультрахолодных нейтронов для РК ПИК

*А. П. Серебров, В. А. Лямкин, А. К. Фомин, М. С. Онегин, М. С. Ласаков А. О. Коптюхов*

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

На базе горизонтального канала ГЭК-4 планируется установить источник для производства ультрахолодных нейтронов, основанных на новом принципе с использованием сверхтекучего гелия. Источник УХН на РК ПИК располагается в помещении 100А на уровне 2.10 на пучке ГЭК-4 реактора ПИК. Криогенное и вакуумное оборудование будет расположено в непосредственной близости от низкотемпературной части источника УХН в помещении 100А РК ПИК.

Источник УХН будет расположен в нише разборной биологической защиты канала ГЭК-4 диаметром 1000 мм. В канале будет размещена головная часть источника УХН, состоящая из: конвертора – сосуда со сверхтекучим гелием при температуре 1К, предзамедлителя – материала способный эффективно понижать температуру нейтронов внутри гелиевой камеры, замедлителя – материал для термализации нейтронов в тепловую область и защитного экрана – свинца, толщиной 10 см для защиты конструкций источника УХН от гамма квантов.

Рассчитанная плотность УХН в камере спектрометра ЭДМ для источника ультрахолодных нейтронов на РК ПИК составляет  $2,2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-3}$ , при плотности УХН в закрытой камере источника равной  $5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-3}$ . Это всего на порядок меньше плотности УХН, которую можно получить на РК ВВР-М [1], но тем не менее на два порядка выше существующих плотностей УХН в мире. На новом источнике УХН запланирована обширная программа исследований по физике фундаментальных взаимодействий [2].

1. Онегин М.С., Лямкин В.А., Серебров А.П., Фомин А.К. Оценка производства ультрахолодных нейтронов в проекте источника на реакторе ВВР-М // Журнал технической физики. 2017. Т. 87, N 4, С. 612-616.

2. Серебров А.П. и др. Программа исследования фундаментальных взаимодействий для реактора ПИК // Ядерная физика. 2016. Т. 79, N 3, С. 187.

## Исследование экологически безопасной газовой смеси для детекторов частиц

*Г. Е. Гаврилов, С. А. Насыбулин*

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

Согласно целому ряду международных соглашений, включая Парижское соглашение ООН, принятое в конце 2015 года, в будущем суммарные промышленные выбросы CO<sub>2</sub> в атмосферу должны быть значительно сокращены. К числу экологически опасных установок по проведённым оценкам попадают экспериментальные установки Большого Адронного Коллайдера (БАК) – CMS и ATLAS. Причиной этого является активное использование фреонов в газоразрядных детекторах на этих установках. Экологически безопасная альтернативная рабочая газовая смесь для газоразрядных детекторов, используемых в экспериментах, наряду с решением экологической проблемы обязана гарантировать высокую радиационную стойкость этих детекторов и снижать риск возникновения Мальтер-эффекта [1].

В эксперименте представлены результаты исследования компактного прототипа мюонной пропорциональной камеры в условиях интенсивного радиационного облучения. Особенностью данного исследования, является изучение деградации рабочих характеристик камеры, при замене компонента CF<sub>4</sub> из стандартной газовой смеси на экологически безопасный HFO. В ходе эксперимента аккумулярованный заряд составил 1,189 К/см. Было установлено, что с набором дозы рабочие характеристики остаются удовлетворительными, вплоть до очень больших доз порядка 0,7 К/см, что соответствует многолетней эксплуатации детекторов в условиях реального эксперимента [2–3].

Исследование показало, что использование газа HFO в качестве одного из компонентов газовой смеси выглядит многообещающе. Теперь требуются дополнительные исследования, условия которых максимально приближены к реальному эксперименту.

1. Гаврилов Г. Е., Маев О. Е., Майсузенко Д. А., Насыбулин С. А. // Ядерная физика и инжиниринг. 2018. Т. 9. № 4

2. Ferguson T. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 2003. V. 515. P. 266. 3. Acosta D. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 2003. V. 515. P. 226.

## Прецизионное измерение бета-спектра $^{210}\text{Bi}$ для определения потока CNO-нейтрино в эксперименте Borexino

*А. В. Дербин, И. С. Драчнев, И. С. Ломская, В. Н. Муратова, Н. В. Ниязова, Д. А. Семенов, Е. В. Унжаков*

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

Прецизионное измерение бета-спектров играет важную роль для некоторых фундаментальных задач, включающих в себя моделирование фоновых процессов для экспериментов с редкими событиями, таких, например, как нейтринная физика. В настоящее время наибольший интерес в исследовании спектра солнечных нейтрино, проводимого на детекторе Borexino, представляют собой нейтрино, образованные в результате реакций азотноуглеродно-кислородного (CNO) цикла [1]. Хотя вклад CNO цикла в общее энерговыделение Солнца составляет около 1%, цикл CNO играет ключевую роль в астрофизике, являясь основным источником энергии в более массивных и горячих звездах, находящихся на поздних стадиях эволюции. Основной проблемой в определении вклада таких нейтрино является существенная схожесть бета-спектра  $^{210}\text{Bi}$  и спектра электронов отдачи от CNO-нейтрино. Детектор Borexino имеет наибольшую чувствительность к CNO-нейтрино, для выделения которых необходимо с хорошей точностью знать спектр  $^{210}\text{Bi}$ .

В Отделе п/п ядерных детекторов ПИЯФ был произведен спектрометр на основе Si(Li) детекторов диаметром 16 мм и толщиной 5 мм. Детектор имеет два спектрометрических канала, что позволяет измерять сигналы в интервале от 5 кэВ до 6 МэВ. Энергетическое разрешение для электронов с энергией 1 МэВ составило 2 кэВ. Безносительный источник  $^{210}\text{Bi}$  был изготовлен на подложке из нержавеющей стали толщиной 12 мкм. Накопление данных производилось в течение 640 часов.

Симуляция спектрометра выполнялась при помощи метода Монте-Карло. Функция отклика спектрометра представляла собой гауссовый пик от вылетающих электронов и хвост, связанный, в основном, из электронов обратного рассеяния. При подгонке спектра в виде свертки функции отклика и теоретической формы бета-спектра использовалась функция форм-фактора, имеющая только два свободных параметра. Для достижения наибольшей точности в определении параметров были проведены процедуры учета систематических и статистических ошибок. В результате подгонки были получены наиболее точные значения параметров функции форм-фактора по сравнению с предыдущими исследованиями [2, 3].

Бета-спектр  $^{210}\text{Bi}$ , полученный путем умножения форм-фактора на функцию Ферми и фазовый множитель, позволил провести анализ вклада  $^{210}\text{Bi}$  в полный спектр детектора Borexino. Для энергий электрона выше 300 кэВ доля бета-спектра  $^{210}\text{Bi}$  составляет  $58.5 \pm 0.3\%$ ; выше 500 кэВ -  $38.1 \pm 0.3\%$  и выше 700 кэВ -  $22.4 \pm 0.3\%$ . Полученная относительная погрешность составила величину около 1%, которая является достаточной для анализа данных детектора Borexino с целью выделения вклада CNO-нейтрино. Таким образом, в настоящей работе были выполнены прецизионные измерения и проведен анализ вклада бета-спектра  $^{210}\text{Bi}$  в полный спектр детектора Borexino. Полученные результаты позволят определить поток солнечных CNO-нейтрино, регистрируемых в эксперименте Borexino.

1. Agostini M. et al. Comprehensive measurement of pp-chain solar neutrinos //Nature. – 2018. – Т. 562. – №. 7728. – С. 505-+

2. Carles A. G., Malonda A. G. Precision measurement of the RaE shape factor //Nuclear Physics A. – 1996. – Т. 596. – №. 1. – С. 83-90

3. Daniel H. Das  $\beta$ -spektrum des RaE //Nuclear Physics. – 1962. – Т. 31. – С. 293-307

## Разработка, создание и тестирование пропорциональной камеры для эксперимента по измерению радиуса протона (проект «Протон»)

*А. В. Пульная*

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

Радиус протона является фундаментальной физической константой. Впервые измерения этой величины были проведены в 60-х годах в ряде электронных экспериментов. С тех пор было принято считать, что радиус протона равен  $0.8775(51)$  fm [1]. В 2010 году был проведен новый эксперимент с использованием мощного ускорителя мюонов в швейцарском институте Пауля Шеррера [2,3]. По итогам полученных экспериментальных данных была сделана оценка радиуса протона, которая оказалась на 4% меньше ( $0.84087(39)$  fm) измеренного ранее значения. Таким образом, появилось разногласие в экспериментальных данных, так называемое «загадка радиуса протона», которое до сих пор не имеет объяснения.

Точность результатов предыдущих экспериментов такова, что невозможно объяснить разницу между различными экспериментальными значениями радиуса.

Возникла идея эксперимента по прецизионному измерению радиуса протона. В рамках нового проекта будут проведены измерение дифференциального сечения  $\sigma_{\text{el}}$  упругого рассеяния, которое необходимо для извлечения радиуса протона.

Основным требованием к новому проекту является точность измерения сечения упругого рассеяния частиц. Поэтому в центральном детекторе предлагается разместить систему пропорциональных камер, являющуюся основным элементом фронтального детектора. Критическим для проведения эксперимента является обеспечение надёжного определения координат рассеянного электрона.

Фронтальный детектор (forward tracker) рассматривается как система 3-х пар катодных стриповых камер X1/Y1, X2/Y2 и X3/Y3 с 3 mm дрейфовым промежутком между анодом и катодом. Основной характеристикой рабочего режима камеры планируется давление 20 bar на газовой смеси Ar/CH<sub>4</sub> (с целью остановить протоны с энергией 10 MeV внутри чувствительного объема, а также для увеличения скорости счета.)

Требуемое разрешение для катодной плоскости с проволоками, объединенными в стрипы по 2.5 mm, 30  $\mu$ m при обеспечении абсолютной линейной шкалы на базе 600 mm 0.02% (0.12 mm погрешности на всей шкале).

Был изготовлен тестовый вариант одной катодной плоскости. Произведен анализ яркостных спектров тестовой плоскости с целью определения координат каждой проволоки. Полученные результаты совпадают с запланированными оценками необходимыми для проведения эксперимента.

1. Mohr, P.J. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2010 / P.J. Mohr, B.N. Taylor, D.B. Newell // Rev. Mod. Phys. 2012. Vol. 84. P. 1527-1605.

2. Pohl, R. (CREMA Collab.) The size of the proton / R. Pohl, et al. // Nature. 2010. Vol. 466. 213-216.

3. Antognini, A. (CREMA Collab.) Proton Structure from the Measurement of 2S-2P Transition Frequencies of Muonic Hydrogen / A. Antognini, et al. // Science. 2013. Vol. 339. P. 417-420

## Разработка системы газообеспечения для эксперимента PolFusion (эксперимент Polarized Fusion)

*А. Ю. Рождественский*

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

Эксперимент PolFusion направлен на исследование реакции dd-ядерного синтеза с поляризованными дейтронами. В эксперименте будут измерены дифференциальные сечения рассеяния реакций dd-синтеза с образованием  ${}^3\text{He} + n$  либо  ${}^3\text{H} + p$  в конечном состоянии при различной взаимной ориентации спинов сталкивающихся дейтронов с энергией 10-100 кэВ.

Экспериментальные данные о сечении дейтериевого ядерного синтеза с поляризованными исходными ядрами при низких энергиях на сегодняшний день отсутствуют [1]. Эксперимент PolFusion будет первым экспериментом такого рода. Энергии дейтронов лежат в области до 100 кэВ, т.к. именно при низких энергиях ожидается получить наиболее интересные результаты.

В практическом плане измерение сечения синтеза поляризованных ядер дейтерия, а также относительного вклада каналов  ${}^3\text{He} + n$  и  ${}^3\text{H} + p$  и углового распределения продуктов ядерного синтеза может быть полезным при разработке схем термоядерного синтеза с использованием поляризованных ядер [2]. Угловое распределение продуктов ядерного синтеза, в частности нейтронов, это важный вопрос, возникающий при проектировании термоядерных реакторов, поскольку нейтронный поток является одним из основных факторов, разрушающих стенки и защиту реактора, и опасен как для персонала, так и для контрольно-измерительных приборов.

Основными элементами экспериментальной установки являются источник поляризованных атомов (ABS) и источник поляризованных ионов дейтерия (POLIS). Для работы данных источников необходимо создание особой газовой системы.

Разработанная газовая система обеспечивает независимое снабжение обоих источников рабочим газом из баллонов, расположенных вне экспериментального зала. Поток газа в каждый источник стабилизируется контроллером массового расхода. Для предотвращения деполяризации атомов на сопле диссоциатора предусмотрено добавление в рабочий газ небольшого количества кислорода (порядка 1% от основного потока), который необходим для образования слоя льда на поверхности сопла диссоциатора. Отдельного внимания заслуживает часть газовой системы для заполнения вакуумных объёмов установки азотом. Заполнение азотом производится для обеспечения безопасности и должно срабатывать как при штатном выключении установки, так и при аварийном отключении электропитания.

Созданная газовая система управляется с помощью основной управляющей программы экспериментальной установки. Все параметры газовой системы (давления, массовые расходы газов, состояние клапанов) сохраняются в общей базе данных.

1. H. Paetz gen. Schieck, Eur. Phys. J. A 44, 321-354 (2010).
2. R.Engels et al. Physics of Particles and Nuclei 45, No. 1, 341-343 (2014).

## Методы уменьшения естественного радиоактивного фона в экспериментах по поиску двойного безнейтринного бета-распада с германиевыми детекторами

*Н. С. Румянцева*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Экспериментальный поиск двойного безнейтринного бета ( $0\nu\beta\beta$ ) распада [1] – пожалуй, единственный доступный способ ответить на вопрос, является ли нейтрино майорановской частицей. Эксперимент, претендующий на успех в данной области исследований, должен отвечать, как минимум, следующим требованиям: во-первых, быть низкофоновым, а во-вторых, вследствие крайне малой вероятности искомого процесса, использовать значительное количество изотоп-кандидата на  $0\nu\beta\beta$  распад (желательно, чтобы детектор был изготовлен непосредственно из исследуемого изотопа). Кроме того, принципиальным преимуществом эксперимента будет являться высокое энергетическое разрешение детектирующей системы.

Полупроводниковые детекторы [2], изготовленные из германия, обогащенного изотопом Ge-76 и обладающие великолепным энергетическим разрешением, являются отличными кандидатами для использования в проектах по поиску  $0\nu\beta\beta$  распада. Существующие эксперименты этого направления, оперирующие с германиевыми детекторами (GERDA [3], Majorana [4]), проводятся в подземных лабораториях с целью снижения фона от космического излучения. Помимо этого, сделать эксперимент низкофоновым позволяет тщательный отбор конструкционных материалов, окружающих детекторы, а также использование различных методик активного подавления естественного радиоактивного фона [3].

Усовершенствование имеющихся методов снижения фона в германиевых детекторах необходимо для успешного осуществления новейших проектов по поиску  $0\nu\beta\beta$  распада Ge-76 [5]. На данный момент проводятся исследования новой низкофоновой электроники, а также подбор новых конструкционных материалов для создания оправок детекторов для ультранизкофоновых экспериментов следующего поколения.

*Данные исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00213.*

1. Румянцева Н.С., Гусев К.Н. // Вестник Международного университета природы, общества и человека «Дубна». 2019. Т. 1 (42). С. 32-40.
2. Акимов Ю.К. Полупроводниковые детекторы ядерных излучений. Дубна: ОИЯИ, 2009, с. 277.
3. Agostini M., Allardt M., Bakalyarov A.M. et al. // Nature. 2017. V. 544. P. 47.
4. Aalseth C. E., Abgrall N., Aguayo E. et al. // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 120. 132502
5. Abgrall N., Abramov A., Abrosimov N. et al. // AIP Conference Proceedings. 2017. V. 1894. 020027.

## Статус и перспективы эксперимента Нейтрино-4

*А. П. Серебров<sup>1</sup>, Р. М. Самойлов<sup>1</sup>, В. Г. Ивочкин<sup>1</sup>, А. К. Фомин<sup>1</sup>, А. О. Полюшкин<sup>1</sup>,  
В. Г. Зиновьев<sup>1</sup>, П. В. Неустроев<sup>1</sup>, В. Л. Головцов<sup>1</sup>, А. В. Чёрный<sup>1</sup>, О. М. Жеребцов<sup>1</sup>,  
М. Е. Чайковский<sup>1</sup>, М. Е. Зайцев<sup>1,2</sup>, А. А. Герасимов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> ДИТИ НИЯУ МИФИ, Димитровград, Россия

Цель эксперимента Нейтрино-4 – поиск стерильного нейтрино. Гипотеза существования четвёртого стерильного состояния нейтрино, которое не описывается Стандартной моделью, подкрепляется «аномальными» результатами некоторых экспериментов. Проверка эффективности детекторов солнечных нейтрино GALLEX и SAGE с нейтринными источниками <sup>51</sup>Cr и <sup>37</sup>Ar показала дефицит нейтрино [1] («галлиевая аномалия»). Новая оценка потока реакторных антинейтрино привела к пересмотру результатов 19 экспериментов. Итогом этого стало также обнаружение дефицита антинейтрино («реакторная антинейтринная аномалия» [2]). Поскольку в обоих случаях достоверность наблюдаемого явления не превышает 3 стандартных отклонений, появилась необходимость проведения новых экспериментов на коротких расстояниях от источника.

В эксперименте Нейтрино-4 измеряются поток антинейтрино и спектры на разных расстояниях от исследовательского реактора. По изменению формы спектра можно делать оценки на параметры осцилляций нейтрино в стерильное состояние ( $\Delta m_{14}^2$  и  $\sin^2 2\theta_{14}$ ). Эксперимент Нейтрино-4 имеет преимущество в чувствительности к значениям  $\Delta m_{14}^2 > 2\text{eV}^2$  благодаря компактной зоне реактора СМ-3, малому минимальному расстоянию между детектором и активной зоной реактора и большому диапазону расстояний для перемещения детектора [3]. Представлены последние результаты эксперимента Нейтрино-4. На уровне достоверности  $2.8\sigma$  наблюдается эффект осцилляций. Обсуждается анализ возможных систематических ошибок [4].

Главной проблемой проведения измерений потока нейтрино и нейтринного спектра на исследовательском реакторе являются условия высокого фона космического излучения в лаборатории на поверхности Земли. Для улучшения результата помимо продолжения действующего эксперимента необходимо и проведение нового исследования с улучшенным нейтринным детектором. Проект новой нейтринной лаборатории на реакторе СМ-3 готовится к реализации. Использование сцинтиллятора с высокой концентрацией гадолиния (5 г/л) и с возможностью разделения сигналов по форме позволит подавить фон случайных совпадений в 3 раза, а коррелированный фон вдвое. Таким образом, новый детектор ещё большего объёма позволит улучшить точность измерения потока реакторных антинейтрино в 3.1 раза.

1. SAGE collaboration, J. N. Abdurashitov et al., Measurement of the response of a Ga solar neutrino experiment to neutrinos from an Ar-37 source // Phys. Rev. C73 (2006) 045805.

2. G. Mention et al., The Reactor Antineutrino Anomaly // Phys. Rev. D83 (2011) 073006,

3. A.P. Serebrov et al., Neutrino-4 experiment on the search for a sterile neutrino at the SM-3 reactor // JETP 121 (2015),

4, 578-586. 4. A.P. Serebrov et al., First Observation of the Oscillation Effect in the Neutrino-4 Experiment on the Search for the Sterile Neutrino // JETP Letters 109 (2019), 4, 213-221.

**Проектирование и изготовление на 3D-принтере кристаллического дефлектора для эксперимента по каналированию 1 ГэВ протонов на синхроциклотроне НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ**

**Г. А. Сумбатьян<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>2</sup> *НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

Каналирование заряженных частиц в изогнутых монокристаллах кремния успешно используется для отклонения пучков заряженных частиц высоких энергий (см., например, [1]). Кристаллические дефлекторы по сравнению с магнитными системами имеют очень компактные размеры и намного большее эффективное поле. Изгиб кристаллов, как правило, обеспечивается специальными кристаллодержателями, которые могут иметь довольно сложную конструкцию и технологию изготовления. Это оправдано при использовании кристаллов в составе ускорительных комплексов, где нужно выполнить требования к радиационной стойкости и долговременной стабильности всех элементов. Однако при проведении исследовательских работ по каналированию эти требования весьма снижены, поэтому упрощение процесса изготовления кристаллодержателя представляет интерес.

В настоящей работе в ходе подготовки кристаллического дефлектора с антикластическим изгибом для эксперимента по каналированию 1 ГэВ протонов на синхроциклотроне ПИЯФ изучена возможность автоматизированного изготовления кристаллодержателя на обычном 3D-принтере из полимерного материала. Дизайн кристаллодержателя был выполнен в программе Autodesk Inventor, а затем конвертирован в исполнительный файл 3D-принтера. Режим печати принтера был подобран так, чтобы слои полимера были ровными и максимально точно накладывались друг на друга. Изготовленные детали при необходимости подвергались небольшой ручной обработке. Поверхности деталей, определяющие изгиб, были исполнены на фрезерном станке. После сборки с кристаллом полученный изгиб был измерен оптическими методами. Результаты подтвердили проектные оценки.

1. А.Г. Афонин и др., Вывод пучка протонов из ускорителя ИФВЭ с помощью коротких кристаллов кремния, Физика элементарных частиц и атомного ядра, т.36, вып.1, стр.42-99, 2005.

## Поиск солнечных аксионов с помощью резонансного поглощения ядрами $^{169}\text{Tm}$

А. В. Дербин, И. С. Драчнев, В. Н. Муратова, Д. А. Семенов, Е. В. Унжаков

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Аксион – гипотетическая массивная псевдоскалярная частица. Предполагаемые свойства аксиона делают его хорошим кандидатом на роль частиц составляющих тёмную материю, чем в настоящее время обусловлен интерес к экспериментальному обнаружению этих частиц. Гипотеза о существовании возникла в результате попытки решения сильной CP-проблемы. Для её решения в 1977 г. Р. Печчеи и Х. Квинн ввели новую хиральную симметрию  $U(1)$ , спонтанное нарушение которой на некотором энергетическом масштабе  $f_A$  позволяет полностью скомпенсировать CP-неинвариантное слагаемое в лагранжиане КХД. В 1978 г. С. Вайнберг и Ф. Вилчек показали, что нарушение хиральной симметрии должно приводить к возникновению новой псевдоскалярной частицы.

Современные теоретические модели аксиона описывают взаимодействие аксиона с обычным веществом с помощью эффективных констант связи:  $g_{Ae}$  (аксион-электрон),  $g_{AN}$  (аксион-нуклон),  $g_{A\gamma}$  (аксион-фотон). Благодаря наличию этих взаимодействий звёзды (и, в частности, Солнце) должны являться интенсивными источниками аксионов за счёт высокой температуры и плотности вещества, а также наличия мощных и протяжённых магнитных полей. Существующие эксперименты по поиску солнечных аксионов опираются на различные процессы для их обнаружения: эффект Примакова ( $g_{A\gamma}$ ), аксиоэлектрический эффект ( $g_{Ae}$ ) или резонансное поглощение атомным ядром ( $g_{AN}$ ).

В лаборатории низкофоновых измерений НИЦ КИ, ПИЯФ была проведена серия экспериментов по поиску резонансного поглощения солнечных аксионов ядрами  $^{57}\text{Fe}$  и  $^{169}\text{Tm}$  [1, 2]. Данные изотопы имеют низколежащие ядерные уровни с энергиями порядка  $\sim 10$  кэВ, с переходами магнитного типа на основное состояние, что позволяет использовать их в качестве мишени для поиска резонансного поглощения аксионов. Экспериментальная установка была скомпонована по принципу «детектор-мишень» на основе  $\text{Si}(\text{Li})$  детектора и позволила получить верхнее ограничение на значение констант связи фксиона ( $g_{A\gamma} \cdot m_A \sim 10^{-5}$ ,  $g_{Ae} \cdot m_A \sim 10^{-7}$ ).

Чувствительность эксперимента можно существенно улучшить за счёт внедрения вещества-мишени в рабочий объём детектора, так как самопоглощение гамма-квантов веществом мишени не позволяет эффективно наращивать массу мишени при отдельной компоновке. Так же, значительного прироста чувствительности можно добиться за счёт регистрации конверсионных электронов, поскольку рассматриваемые переходы имеют коэффициенты внутренней конверсии порядка  $\sim 10^3$ .

В настоящее время ведётся работа над созданием экспериментальной установки с криогенным болометрическим детектором на основе  $^{169}\text{Tm}$ содержащего кристалла  $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ . Для изучения его работы в болометрическом режиме нами был выращен и установлен в гелиевый криостат растворения тестовый образец кристалла массой  $\sim 8$  г. Полученные данные подтверждают принципиальную возможность использования данного материала для создания низкофонового болометрического детектора [3].

1. A.V. Derbin et al., New limit on the mass of 14.4-keV solar axions emitted in an M1 transition in  $^{57}\text{Fe}$  nuclei. // *Physics of Atomic Nuclei*. Vol. 74, #4 2011. p. 596, <https://doi.org/10.1134/S1063778811040041>

2. A.V. Derbin et al., Search for solar axions generated by the Primakoff effect with resonance absorption by  $^{169}\text{Tm}$ . // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. Vol. 74, #4 2010. p. 481, <https://doi.org/10.3103/S106287381004012X>

3. E. Bertoldo et al., A test of bolometric properties of Tm-containing crystals as a perspective detector for a solar axion search. // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.162924>

## **Возможность улучшения разрешения массового спектра нейтральных мезонов с помощью пучковых камер**

*А. А. Шангараев, С. В. Евдокимов, Е. С. Кондратюк, С. А. Садовский*

*НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино, Россия*

Пропорциональные камеры, разработанные и созданные в рамках эксперимента Гиперон-М на ускорителе У-70 (Протвино), позволяют измерять импульсы пучковых частиц, попадающих на мишень. Благодаря этому повышается точность измерения масс и ширины нейтральных мезонов, что является основной задачей эксперимента.

Информация об импульсах пучковых частиц позволяет увеличить точность реконструкции нейтральных мезонов, образующихся при взаимодействии пучка с мишенью и регистрируемых в электромагнитном калориметре. В результате наблюдаемые пики мезонов в массовом спектре становятся более узкими, что позволяет улучшить точность реконструкции их масс с помощью метода параметрического анфолдинга [1]. В работе приведены характеристики камер, их координатное разрешение, а так же результаты Монте-Карло моделирования рождения  $\omega(782)$ - и  $f_2(1270)$ -мезонов в эксперименте ГИПЕРОН-М, зарегистрированных без пучковых камер и с ними. Полученные результаты подтверждают возможность улучшения точности измерения масс и ширины нейтральных мезонов с помощью метода параметрического анфолдинга.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-302-00266.*

1. Шангараев А.А. Параметрический анфолдинг масс и ширины резонансов // Сборник тезисов V Всероссийского молодёжного научного форума Open Science. – 2018 – С. 133.

2. F. Sauli. Gaseous radiation detectors: fundamentals and applications. Cambridge University Press, Cambridge (2014)

## Применение многоканальной аналоговой фронт-энд микросхемы для гамма-детекторов на основе SiPM

*А. Ш. Шерги, О. В. Бычкова, Е. В. Попова, А. А. Стифуткин*

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

Кремниевый фотоумножитель (SiPM) совместно со сцинтилляционными кристаллами может быть использован для создания компактных и надежных гамма-спектрометров и является очень привлекательным выбором для создания многоканальных высоко-гранулярных систем, особенно в области ядерной медицины [1]. Однако, разработка таких систем, в которых обычно используются сцинтилляционные кристаллы NaI(Tl) или CsI(Tl), ограничена отсутствием фронт-энд многоканальной электроники, спроектированной для применения с этими «медленными» (времена порядка микросекунд) сцинтилляторами.

Прототип специализированной многоканальной аналоговой интегральной фронт-энд микросхемы для применения в системах на основе SiPM был недавно разработан на кафедре Микроэлектроники НИЯУ МИФИ и изготовлен на XFAB Foundry, используя XH035 технологию [2]. Данная микросхема спроектирована как аналоговая часть в детекторах на основе NaI(Tl) или CsI(Tl) сопряженных с SiPM в качестве фотосенсора, и может быть использована для построения многоканальных систем в таких областях как ядерная физика, ядерная медицина и досмотровая техника.

Для тестирования микросхемы была разработана и изготовлена оценочная плата, обеспечивающая напряжение питания для микросхемы и имеющая разъемы для аналогового и управляющего сигналов, а также порт для связи с компьютером. Для управления микросхемой было разработано приложение в среде LabVIEW, которое позволяет конфигурировать микросхему, считывать ток основных структурных блоков микросхемы, в режиме реального времени считывать данные с внешнего АЦП, подключенного к микросхеме через оценочную плату.

Тестируемая микросхема была подключена к сцинтилляционному детектору на основе SiPM фирмы КЕТЕК и кристалла NaI(Tl). Затем были набраны амплитудные спектры от радиоактивных источников  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{152}\text{Eu}$ ,  $^{54}\text{Mn}$  и  $^{22}\text{Na}$  и получена зависимость энергетического разрешения детектора от энергии гамма-квантов. Для энергии 662 кэВ энергетическое разрешение детектора составило 8.2%.

1. Buzhan P., Karakash A., Teverovskiy Y. Silicon Photomultiplier and CsI(Tl) scintillator in application to portable H\*(10) dosimeter // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip. 2017.

2. Bocharov Y.I., Butuzov V.A., Simakov A.B. Application of a specific integrated circuit for readout and analog processing of signals from silicon multiplier arrays // Instruments Exp. Tech. 2017.

## **Физика и техника реакторов и ускорителей**

## Экспериментальная оценка плотности дислокаций в образцах кремния для экспериментов по каналированию заряженных частиц высоких энергий

*Д. И. Бондаренко*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Санкт-Петербургский национальный исследовательский академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>2</sup> *НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

Каналирование заряженных частиц в изогнутых кристаллах используется для формирования и вывода пучков на ускорителях [1]. Дефекты в кристаллах приводят к возникновению внутренних напряжений, которые деформируют кристаллическую решетку. При прохождении вблизи дефектов через области с высокой кривизной каналов частица может выйти из состояния каналирования. Согласно работе [2] наибольший вклад в деканалирование при высоких энергиях вносят линейные дислокации. В простейшем случае дислокация описывается введением лишней атомной полуплоскости в идеальную кристаллическую решетку [3], тогда линия края полуплоскости и представляет собой «линейный» дефект. В работе [2] получено ограничение на допустимую плотность линейных дислокаций на уровне  $3/\text{см}^2$  при энергиях ЛНС и выше. Это делает актуальной проверку используемого материала для отбора наиболее совершенных заготовок для будущих кристаллических дефлекторов и определения в них области с наименьшей плотностью дислокаций.

Согласно методике, описанной в [4], были вырезаны и отшлифованы ориентированные образцы из и слитков бездислокационного кремния и выполнено их селективное травление. Лунки в местах выхода линейных дислокаций на поверхность были исследованы на оптических микроскопах и профилометре NanoVea ST400. Идентификация лунок проводилась по характерной форме, например, тетраэдрической в случае дислокаций в направлении роста слитка. Получены оценки плотности дислокаций, что позволило отобрать наиболее совершенный материал для дальнейших исследований.

1. V.M. Biryukov, Y.A. Chesnokov, V.I. Kotov, Crystal Channeling and Its Application at HighEnergy Accelerators, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1997

2. Бирюков В.М. Деканалирование на дислокациях решетки в изогнутых кристаллах, Протвино, 1996. 21 с.

3. Уэрт Ч. Томсон Р. Физика твердого тела, Москва: Мир, 1969. - 280 с.

4. ГОСТ 19658-81. С. 20-25.

## **Выбор основных параметров нейтроновода ГЭК-4 для источника УХН на РК ПИК**

*А. П. Серебров, В. А. Лямкин, А. К. Фомин, М. С. Онегин, А. О. Коптюхов,  
Г. О. Бородинов, А. А. Недоляк*

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

Особенностью высокопоточного пучкового исследовательского реактора ПИК является наличие большого числа каналов, предназначенных для вывода нейтронных пучков [1]. На пучке ГЭК-4 реактора ПИК планируется установка источника для производства ультрахолодных нейтронов, поэтому возникает необходимость расчета и проектирования нейтроновода на канале ГЭК-4, позволяющего достичь максимально возможной плотности потока выводимых нейтронов. На новом источнике УХН запланирована обширная программа исследований по физике фундаментальных взаимодействий [2].

Нейтроновод будет представлять собой прямую трубу диаметром 277 мм, толщиной стенки 2 мм и длиной 1550 мм с торосферическим доньшком, расположенным в отражателе реактора ПИК – тяжелой воде и находящимся на одной оси с центром активной зоны. Плотность потока выводимых нейтронов прямо пропорциональна внутреннему диаметру нейтроновода и обратно пропорциональна толщине его стенки. Выбор диаметра нейтроновода ограничивается диаметром патрубка канала ГЭК-4. Так как нейтроновод будет находиться в тяжелой воде при давлении в 3 атм., в качестве материала для нейтроновода был выбран сплав АМгЗ, который является относительно прочным и коррозионностойким. В результате прочностных расчетов была выбрана наименьшая возможная толщина стенки нейтроновода.

Для разделения сред в нейтроноводе и зале с экспериментальными установками необходимо наличие мембраны на торцевой части нейтроновода. Мембрана представляет собой алюминиевую фольгу толщиной 100 мкм, закрепленную на решетке, от массы которой зависит плотность пучка выводимых нейтронов. Толщина решетки и её геометрические характеристики выбирались исходя из прочности материала и её массы.

1. Исследовательские ядерные установки государств – участников Содружества Независимых Государств / под ред. М. К. Виноградова, В. Н. Федулина. М.: Гелиос АРВ, 2016. С. 356-374.

2. Серебров А.П. и др. Программа исследования фундаментальных взаимодействий для реактора ПИК // Ядерная физика. 2016. Т. 79, N 3, С. 187.

## Исследование выгорания топлива в ТВС реактора ПИК с выгорающим поглотителем

*Н. С. Жихарева*

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

В работе исследовалось влияние выгорающего поглотителя на темп падения реактивности реактора ПИК. Рассматривалась бесконечная система четырехгранных ТВС, которая содержала 161 твэл, 12 стержней с выгорающим поглотителем (СВП) и два стержня вытеснителя. Твэлы реактора ПИК имеют крестообразное сечение. В качестве топлива использовался  $UO_2$  с добавлением  $Cu$  и  $0,6\% Be$ . Содержание  $^{235}U$  в одном твэле 7,1 грамм [1]. СВП представляют собой полуцилиндры в оболочке из сплава Э-125 ( $Zr+2,5\%Nb$ ). В качестве материала выгорающего поглотителя был выбран порошок смеси оксидов  $ZrO_2+20\%Y_2O_3+5,2\%Gd_2O_3$  [2]. Основным поглощающим элементом являются изотопы гадолиния  $^{155}Gd$  (14,73%) и  $^{157}Gd$  (15,68%), с сечениями  $60900 \cdot 10^{28} m^2$  и  $254000 \cdot 10^{28} m^2$ , соответственно [3]. Общее содержание гадолиния в одном СВП 0,7 грамм. Оболочка ТВС и стержни вытеснителя выполнены из стали 12X18H10T.

Было рассчитано изменение коэффициента размножения во времени для двух вариантов конструкции ТВС. В первом случае на месте СВП были расположены стержни вытеснителя, во втором случае использовались СВП и два стержня вытеснителя. Для расчетов использовалась программа MCNP Version 6.2 [4]. Расчет коэффициента размножения показал, что использование выгорающего поглотителя занижает реактивность. В процессе работы получена динамика выгорания  $^{55}Gd$  и  $^{57}Gd$ .

В дальнейшем, для оценки влияния ВП на кампанию реактора и расхода природного урана, будет моделироваться полномасштабная активная зона ПИК с новым типом ТВС.

1. Физическая модель реактора ПИК-2009. Часть I. Описание критических экспериментов./ А.Н. Ерыкалов, А. С. Захаров, К. А. Коноплев и др. – Гатчина: Препринт ПИЯФ-2823, 2009 – 68с.

2. Компьютерная модель реактора ПИК на основе ПС MCNP. Расчеты нейтроннофизических параметров на этапе физического пуска./ К. А. Коноплев, А. С. Захаров, А. С. Полтавский, И. М. Косолапов – Гатчина: Отчет, 2011.

3. Поглощающие материалы для регулирования ядерных реакторов/ под ред. Б.Г. Арабея и В.В. Чекунова (перевод с английского) –М.: Атомиздат, 1965– 452с. 4. MCNP USER'S MANUAL Code Version 6.2 / Edited by: Christopher J Werner – Los Alamos National Security, LLC, 2017

## Расчет кристаллического дефлектора для эксперимента по каналированию 1 ГэВ протонов на синхроциклотроне НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

*П. Ю. Иванова*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>2</sup> *НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

При прохождении заряженных частиц через кристаллы в направлениях кристаллографических осей или плоскостей наблюдается эффект каналирования. Каналирование заряженных частиц имеет место и при изгибе кристаллов [1], что открывает путь к использованию изогнутых кристаллов для отклонения пучков заряженных частиц [2]. Новый метод управления пучками частиц высоких энергий, основанный на применении изогнутых кристаллов, получил развитие в крупнейших ускорительных центрах мира, включая Большой адронный коллайдер [3].

Широкое развитие ускорительных комплексов протонной терапии делает актуальным исследование возможностей создания высокоэффективных кристаллических дефлекторов для заряженных частиц в области энергий  $\leq 1$  ГэВ. В представленной работе выполнены расчеты возможного кристаллического дефлектора с углом отклонения несколько миллирадиан для протонов с энергией 1 ГэВ.

1. E.N. Tsyganov, 1976, preprint TM-682, TM-684, Fermilab, Batavia.

2. V.M. Biryukov, Y.A. Chesnokov, V.I. Kotov, Crystal Channeling and Its Application at HighEnergy Accelerators, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1997

3. W. Scandale et al., Observation of channeling for 6500 GeV/c protons in the crystal assisted collimation setup for LHC, Physics Letters B758, 2016, Pages 129-133

## **Криогенные мишени легчайших газов (водород, дейтерий, гелий) в экспериментах физики высоких энергий**

*Д. И. Климанский*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Исследования процессов столкновения элементарных ядер на извлеченных пучках ускорительного комплекса NICA с помощью физической установки VM @ N нуждаются в криогенных мишенях с уникальными соотношениями количества рабочего вещества (жидкого водорода, дейтерий или гелий) и масса корпуса мишени, которая может взаимодействовать с ионным пучком, образовывать вторичные частицы и инициировать фоновые события.

В этом исследовании автор предоставил результаты экспериментальных испытаний на охлаждение жидкой водородной мишени. Максимальная охлаждающая способность используемого криокулера GM составляет 1,5 Вт при 4,2 Кельвина, что выглядит приемлемым для такого применения. Использование криокулера GM позволяет создать полностью автономную и мобильную криогенную мишень, которая не зависит от внешнего источника холода. Авторы обращают внимание на серьезную проблему тепловых потерь, в том числе прироста тепла от излучения при максимальной интенсивности пучка  $10^{11}$  частиц/с, и предлагают использовать охлаждающую способность криокулера для ее предотвращения. В ходе экспериментальных испытаний новой жидководородной мишени с охлаждаемым экраном она была успешно испытана. Время работы составило 90 минут, и криокулер GM работал хорошо. Тем не менее, было выявлено много проблем при работе мишени с жидким гелием. Автор предполагает, что необходимы дополнительные исследования тепловых утечек и радиационных потерь непосредственно в составе ускорительного комплекса.

1. Сообщение ОИЯИ №8-8991. «Технология изготовления криогенных мишеней с использованием лавсана и пенопласта». Ю.Т. Борзунов, Л.Б. Голованов, А.П. Цвинев, В.Л. Мазарский, 1975 г.

2. Сообщение ОИЯИ №8-83-191. «Жидководородная мишень с реконденсацией водорода гелием». Ю.Т. Борзунов, Л.Б. Голованов, А.П. Цвинев, В.Л. Мазарский, В.Ф. Чумаков, 1983 г.

3. Сообщение ОЭФ ИФВЭ. «Исследование термодинамических характеристик жидководородной мишени Ø27/L70 во время её работы в составе установки СВД-2.» Ю.Т. Борзунов, Л.Б. Голованов, В.И. Киреев, А.В. Плескач, В.Ф. Чумаков, 2009 г.

4. 12th IIR International Conference on Cryogenics 2012 «»Liquid Cryogen Targets for Experiments in Nuclear Relativistic and Particle Physics» Konstantinov A., Borzunov U., Shimanskiy S., Varava A.

## Тепловой режим источника ультрахолодных нейтронов на реакторе ПИК

А. П. Серебров<sup>1</sup>, В. А. Лямкин<sup>1</sup>, А. О. Коптюхов<sup>1,2</sup>, А. Н. Коваленко<sup>2</sup>, М. С. Онегин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В НИЦ «Курчатовский институт» проходит многоэтапная программа физического пуска исследовательского реакторе ПИК. Одновременно с этим на реакторе создаётся источник ультрахолодных нейтронов. В его работу положен принцип конверсии замедленных реакторных нейтронов в ультрахолодные путем квантовых процессов в сверхтекучем гелии [1]. Источник ультрахолодных нейтронов будет установлен на канале ГЭК-4. В источнике реализуется размещение помещенных друг в друга капсул с жидким дейтерием, замедляющим реакторные нейтроны и сверхтекучим гелием. Для снижения тепловой нагрузки они находятся в вакуумной изоляции. Однако, такое размещение значительно увеличен нагрев от  $\gamma$  и нейтронного излучений. Это делает поддержание низких температур технически более сложным. Криогенная система источника должна обеспечить получение низких температур сверхтекучего гелия и термостатирование дейтерия в установке, находящейся в условиях реакторной тепловой нагрузки.

Дейтерий находится в жидком состоянии в узком температурном диапазоне 18,73-24,12 К [2]. Предварительно аналитическим методом был получен минимальный массовый расход гелия, охлаждающего капсулу. При массовом расходе гелия 3 г/с, температура дейтерия в капсуле не превышает температуру кипения. Данный расход может быть обеспечен благодаря криофану CryoFan Bohmwind при использовании гелия под давлением 1.5 атм.

Поскольку теплопередача в жидком дейтерии обусловлена естественной конвекцией, было проведено численное моделирование процессов теплообмена в дейтериевой капсуле источника. Для достижения поставленной задачи была разработана математическая модель, учитывающей зависимость гамманейтронного излучения от расстояния до активной зоны реактора. Реализация данной модели осуществлялась в среде численного моделирования Comsol Multiphysics методом конечных элементов. Численные эксперименты показывают, что в стационарном режиме при массовом расходе охлаждающего гелия 3 г/с, максимальная температура жидкого дейтерия в капсуле составит в 21.8 К.

1.Серебров А.П., Лямкин В.А., Коптюхов А.О., Онегин М.С. Тепловой режим источника ультрахолодных нейтронов на реакторе ВВР-М // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики -2019. - Т. 19. - № 3(121). - С. 538-545

2.Серебров А.П., Коптюхов А.О., Лямкин В.А. Численное моделирование естественной конвекции жидкого дейтерия в условиях реакторной тепловой нагрузки // Известия высших учебных заведений. Приборостроение -2019. - Т. 62. - № 8. - С. 741-748

## **Использование реактора типа ВТГР для производства водорода – шаг к «зеленой» энергетике будущего**

**Ю. Н. Волков, А. Е. Кругликов, Е. О. Солдатов, А. А. Щербаков**

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

Ядерная энергетика – отрасль энергетики, занимающаяся производством электроэнергии путем преобразования ядерной энергии. Основные преимущества ядерной энергетики заключаются в огромной энергоемкости топлива, способности держать высокий КИУМ, возможности повторного использования топлива. Интенсивное развитие ядерной энергетики можно считать одним из средств борьбы с глобальным потеплением. Несмотря на все текущие успехи в ядерной энергетике, текущие проекты АЭС имеют определенные недостатки. Поэтому необходимы усовершенствования, выходящие за рамки существующих разработок для конкуренции на будущем энергорынке. АЭС нового поколения (поколения IV) должны обладать тепловой эффективностью, близкой к тем, которые имеются на современных тепловых электростанциях. Развитие двухкомпонентной ядерной и атомно-водородной энергетики расширяет потенциал атомной отрасли.

Водородная энергетика – альтернативная отрасль энергетики, основанная на использовании водорода в качестве средства для выработки энергии. Из предлагаемых по программам INPRO или G-4 инновационных ядерных энергоисточников только реакторы с гелиевым теплоносителем способны обеспечить достаточную температуру теплоподвода к агрегатам получения водорода.

Высокотемпературные реакторы на основе микро топлива обладают принципиальными преимуществами по безопасности, связанными с отсутствием плавления активной зоны при авариях с потерей теплоносителя. Технология использования микро топлива располагает к безопасному удержанию топлива и продуктов деления во время работы. В данном докладе представлен обзор технологии использования высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов. Также в работе представлен анализ энерготехнологического комплекса с ядерной энергоустановкой типа ВТГР с модулями преобразования энергии с газотурбинными или паротурбинными установками и термохимическим производством водорода путем паровой конверсии метана или высокотемпературного электролиза.

Расчетное моделирование проводилось с использованием диффузионного программного комплекса с системой подготовки диффузионных констант, а также с использованием прецизионного программного средства.

1. Гребенник В.Н., Кухаркин Н.Е., Пономарев-Степной Н.Н. Высокотемпературные газоохлаждаемые реакторы (физико-технические проблемы ядерной энергетики). – М.: Энергоатомиздат, 2008. – 134 с.

2. Пономарев-Степной Н.Н., Столяровский А.Я., Пахомов В.П. Атомно-водородная энергетика (физико-технические проблемы ядерной энергетики). – М.: Энергоатомиздат, 2008. – 108 с.

**Проект охлаждения камеры источника УХН на РК ПИК с использованием теплообменника**  
**А. П. Серебров, В. А. Лямкин, А. К. Фомин, М. С. Онегин, А. О. Коптюхов, А. А. Недоляк, Г. О. Бородинов**

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

На базе горизонтального канала ГЭК-4 РК ПИК планируется установить источник для производства ультрахолодных нейтронов, основанных на новом принципе с использованием сверхтекучего гелия [1]. Температура сверхтекучего гелия в источнике будет поддерживаться на уровне 1 К. Источник находится под воздействием различных теплопритоков, суммарная величина которых составит 2 Вт, что потребует непрерывного теплоотвода от камеры источника УХН. Мировой опыт получения температур ниже 1 К показывает большую эффективность криогенного контура с использованием откачки паров изотопа Гелий-3.

Из камеры источника УХН Гелий-4, при температуре 1 К, попадает в теплообменную часть через связующий трубопровод. Чтобы обеспечить требуемый отвод тепла от Гелия-4, была спроектирована теплообменная часть источника. Была рассчитана необходимая площадь поверхности теплообмена и диаметр связующего трубопровода. Через теплообменный аппарат Гелий-4 отдаёт своё тепло гелию-3, в результате чего последний испаряется, охлаждая поверхность теплообменника. Для получения температур Гелия-3 ниже 1 К необходимо поддерживать давление насыщенных паров на уровне 850 Па.

На новом источнике УХН запланирована обширная программа исследований по физике фундаментальных взаимодействий [2].

1.Серебров А.П. и др. Высокоинтенсивные источники ультрахолодных нейтронов на реакторах ВВР-М и ПИК // Кристаллография. 2016. Т. 61, N 1, С. 157-162.

2.Серебров А.П. и др. Программа исследования фундаментальных взаимодействий для реактора ПИК // Ядерная физика. 2016. Т. 79, N 3, С. 187

## **Коррозионные испытания материалов экспериментальных каналов реактора ПИК**

*Л. Д. Тебелев, С. Р. Фридман, И. В. Паршин, Т. В. Воронина*

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

Одной из особенностей конструкции исследовательского реактора ПИК является наличие внутрикорпусных элементов – исследовательских экспериментальных каналов (ЭК), выполненных из алюминиевых сплавов АД1, АМг3.

Экспериментальные каналы реактора ПИК в период выполнения программы физпуска находились в тяжелой воде в течение 6 лет с 2010 по 2016 год.

После осмотра ЭК было обнаружено на них наличие коррозионных повреждений. Впоследствии было произведено удаление коррозионных дефектов (язв, питтингов) путем механической выборки металла [1].

Необходимость в обосновании остаточного ресурса ЭК определяет постановку целей выполняемых работ:

исследование коррозионной стойкости материалов экспериментальных каналов реактора ПИК в тяжелой воде на контрольных образцах с покрытием и без пассивирующего покрытия;

оценка эффективности блокировки коррозионных процессов в тяжелой воде на поверхности контрольных образцов из алюминиевых сплавов марки АД1 и АМг3 в зависимости от типа покрытия.

Программа выполнения работ включает в себя разработку и проведение испытаний образцов для определения их коррозионной стойкости в тяжелой воде, разработку и изготовление установки и оснастки для выполнения испытаний, материаловедческие исследования образцов до и после испытаний [2]:

- измерение геометрических размеров,
- взвешивание, - металлографические исследования,
- фотографирование внешнего вида;
- измерение глубин коррозионных дефектов;

По итогам проведенного исследования планируется провести сравнительный анализ данных о коррозионной стойкости образцов с покрытием и без покрытия для каждой марки применяемого материала и дать рекомендации по технологии нанесения антикоррозионного покрытия.

1. О возможности использования экспериментальных каналов ПИК на 1 этапе (до 100 кВт) энергопуска: Техническое решение № 18 ЭД.ПИК-177.00.ТР, 2018 г.

2. Программа исследований контрольных образцов материалов экспериментальных каналов реактора ПИК с оценкой их коррозионной стойкости в тяжелой воде. ПИЯФ, Гатчина 2019 г. Программа №19РК-079.00, 2019 г

## Методы получения интенсивных ионных пучков твердых веществ из ЭЦР источника ионов

*С. Л. Богомолов, Д. К. Пугачев, В. Н. Логинов, А. А. Ефремов, В. Е. Миронов, А. Е. Бондарченко, К. И. Кузьменков, А. Н. Лебедев, Н. Ю. Язвницкий*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Получение высоко зарядных ионов твердых веществ является актуальной задачей для современной физики. Облучение ионами твердых веществ необходимы для таких сфер как ядерная физика, радиационная физика, физика твердого тела и др. На данный момент ведутся работы по изучению и оптимизации трех основных методов. Первый метод заключается в испарении веществ посредством резистивного или индукционного нагрева в печи. Второй метод – распыление образца ионами плазмы. Последний метод – MIVOC (Metal ion from volatile compound) – испарение металлоорганических соединений в плазму. Выбор наилучшего способа получения твердых веществ из ЭЦР источника зависит от конкретных свойств материалов.

### Испарение из печи

Метод основан на резистивном нагреве тигля с веществом. Верхний температурный предел составляет 900 °С, что определяет диапазон рабочих материалов. Максимальная мощность нагрева составляет 25 Вт. Для нагрева тигля с внутренним диаметром 4,8 мм и внешним диаметром 6,8 мм используется проволока из вольфрама диаметром 0,1 мм. Печь установлена на подвижном держателе внутри ионного источника, который позволяет регулировать её положение относительно плазмы. Испарение из печи используется для экспериментов на циклотронах: У-400, У-400М, ДЦ-280 для получения кальция, лития, магния и других веществ.

### Плазменное распыление

Экспериментальное оборудование включает в себя образец распыляемого материала под отрицательным потенциалом, располагаемый в камере ионного источника в области близкой к плазме, механизм регулировки положения стержня с образцом и систему его охлаждения. Эксперименты по получению ионного пучка ванадия с использованием распыления были успешно проведены в ЛЯР на источнике DECRIS-SC. На циклотроне ИЦ-100 ионный пучок ускорен до 62,5 МэВ с выводом на мишень. Сеанс облучения мишени длился в течение 125 часов, расход материала составил 1,3 мг/ч.

### Метод MIVOC

Метод MIVOC был разработан в Финляндии в 1994 [1]. Он основан на использовании металлоорганических соединений, имеющих относительно высокое давление пара ( $10^{-3}$  Торр) при комнатной температуре. Такое давление пара является удовлетворительным для работы ЭЦР источника при достаточной проводимости тракта подачи пара. В Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ, на испытательном стенде ЭЦР источников ионов, было проведено множество экспериментов по получению 66 таких элементов как Co, Cr, Ni, V, Ge и Hf.[2] Успешные испытания позволили проводить эксперименты по спектроскопии сверхтяжелых элементов с использованием ионов  $^{50}\text{Ti}$  и  $^{54}\text{Cr}$  на циклотроне У-400.

1. H. Koivisto, J. Arje, M. Nurmi Metal ions from the volatile compounds method for the production of metal ion beams // Rev. Sci. Instrum., 69, (2). 1998, p. 785–787.

2. S. L. Bogomolov, A. E. Bondarchenko, A. A. Efremov et al. Production of Intense Metal Ion Beams from ECR Ion Sources Using the MIVOC Method Physics of Particles and Nuclei Letters, 2015, Vol. 12, No. 7, pp. 824–830.

## Анализ динамики импульсного реактора периодического действия ИБР-2М

Ю. Н. Пепельшев<sup>1</sup>, А. К. Попов<sup>1</sup>, Д. Сумхуу<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

<sup>2</sup> Институт физики и технологии Монгольской академии наук, Улан-Батор, Монголия

Представлены результаты анализа динамики импульсного реактора периодического действия ИБР-2М, представляющего собой модернизированный вариант реактора ИБР-2, работавшего с 1984 по 2006 г. ИБР-2М генерирует мощные нейтронные импульсы шириной 200 мкс на половине высоты с частотой  $5 \text{ с}^{-1}$  при средней мощности 2 МВт. Принципиальное влияние на динамику реактора оказывает быстрая обратная связь, обусловленная разогревом реактора. Обратная связь (ОС) существенно влияет на переходные процессы изменения мощности и запас устойчивости реактора. Со временем параметры ОС меняются, что требует их постоянной оценки и анализа. Для этого создана математическая модель динамики ИБР-2М [1-3]. С её помощью осуществляется оценка параметров ОС в результате обработки зарегистрированных переходных процессов мощности при преднамеренном изменении реактивности. Затем вычисляется запас устойчивости в режиме саморегулирования и в режиме с автоматическим регулятором. В работе приведены результаты моделирования динамики реактора с измеренными параметрами ОС. Показано, что реактор устойчив как в режиме саморегулирования, так и в режиме с автоматическим регулятором. Также показано, что запас устойчивости реактора с автоматическим регулятором существенно выше, чем в режиме саморегулирования. Однако с ростом средней мощности запас устойчивости уменьшается как в одном, так и в другом режиме. Измеренный запас устойчивости ИБР-2М достаточен для надежной и безопасной работы реактора в штатном режиме.

1. Pepelyshev Yu. N., Popov A. K., Sumkhuu D. Model of Dynamics of the IBR-2M Pulsed Reactor for Study of Transient Processes in a Wide Range Change of Power // *Annals of Nuclear Energy*, 2015, vol. 85, p. 488–493.

2. Пепельшев Ю. Н., Попов А. К., Сумхуу Д., Сангаа Д. Модель динамики импульсного реактора ИБР-2М для анализа быстрых переходных процессов // *Письма в журнал Физика элементарных частиц и атомного ядра*, 2015, т. 12, вып. 3(194), с. 682–686.

3. Пепельшев Ю. Н., Попов А. К., Сумхуу Д. Оценка параметров мощностной обратной связи реактора ИБР-2М с помощью прямоугольных колебаний реактивности // *Атомная энергия*, 2017, т. 122, вып. 2. с. 63–68.

## Расчет тракта транспортировки протонного пучка для онкоофтальмологического центра ПЛТ на базе циклотрона Ц-80 в Гатчине

*С. А. Артамонов, Е. М. Иванов, Г. А. Рябов, В. А. Тонких*

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

Циклотрон Ц-80 предназначен как для производства медицинских изотопов, так и для создания офтальмологического центра по лечению раковых заболеваний глаза [1]. Напомним, что для производства изотопов требуется пучок с высокой интенсивностью  $\geq 100 \mu\text{кА}$  ( $6 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ ), а для офтальмологии необходим пучок всего  $\leq 10^{10} \text{ с}^{-1}$ . Одновременный вывод двух таких пучков из циклотрона Ц-80 является сложной технической и физической задачей. Она рассмотрена в работе [2].

Настоящая работа посвящена разработке проекта тракта, позволяющего оперативно, не теряя ускорительное время, переходить с одного режима работы циклотрона на другой без кардинальной перестройки систем ускорителя.

Выяснено, что уменьшение интенсивности пучка на пять порядков можно произвести по алгоритму, состоящему из двух этапов:

1) как показывают оценки, можно отключить фокусирующие соленоиды в системе аксиальной инжекции, что позволит уменьшить интенсивность в  $\sim 1000$  раз без увеличения радиационной нагрузки на системы ускорителя;

2) оставшуюся интенсивность  $\sim 0.1 \mu\text{кА}$  ( $6 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ ) можно уменьшить примерно в 100 раз за счет введения коллиматора размером  $6 \text{ мм} \times 6 \text{ мм}$  в тракт транспортировки.

Расчет оптики производился с помощью программы Trace-3D [3]. Влияние коллиматора на фазовый портрет пучка рассчитывалось следующим образом. На  $x$  и  $z$  фазовые эллипсы пучка при входе в тракт транспортировки накладывались прямые линии, являющиеся отображением апертуры коллиматора  $x, z \leq 3 \text{ мм}$  на вход тракта с помощью матрицы перехода. В часть фазового пространства, ограниченного входными эллипсами пучка и прямыми отраженного коллиматора, вписывался новый эллипс. Такая процедура позволяет перейти к новому «эффективному» эллипсу пучка, проходящему без потерь через тракт и коллиматор. Отношение площади вписанного фазового эллипса к площади первоначального эллипса определяет коэффициент уменьшения интенсивности.

Предложенная схема тракта является наиболее простой, радиационночистой, с наименьшим числом элементов, дешевой и легко осуществимой. Для производства изотопов важен интеграл облучения. Поэтому переключение пучка на некоторое время в режим для офтальмологических нужд, отключив только соленоиды в системе аксиальной инжекции и переключив поворотный магнит, не является проблемой.

1. S.A. Artamonov, D.A. Amerkanov, E.M. Ivanov, V.I. Maximov, G.F. Mikheev, G.A. Riabov, V.A. Tonkikh. The status of the accelerator complex NRC KI – PNPI // XXVI Russian Particle Accelerator Conference RUPAC 2018, 1-5 October, Protvino, WEXMH03, p. 65

2. С.А. Артамонов, Е.М. Иванов, Г.А. Рябов, В.А. Тонких. “Одновременный вывод двух пучков из циклотрона Ц-80 НИЦ КИ – ПИЯФ”// OPENSOURCE 2018 . Сборник научных трудов V ежегодного Всероссийского молодежного научного форума. 2018. С. 1.

3. K. Crandall and D. Rusthoi, “TRACE 3-D Documentation,” Third Edition, LA-UR-97-886, 106 pp (1997).

## **Анализ шумов энергии импульсов реактора ИБР-2М**

***Ю. Н. Пепельшев, Ц. Цогтсайхан***

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Импульсный реактор ИБР-2М, сданный в эксплуатацию в 2012 г., есть модернизированная версия реактора ИБР-2, остановленного в 2006 г. в связи с выработкой ресурса. По сравнению с реакторами стационарного типа чувствительность реактора ИБР-2М к шумам реактивности более чем на порядок выше.

Случайные колебания реактивности ИБР-2М вызваны работой различных технологических систем реактора, определяющих его нормальное функционирование, таких, например, как системы охлаждения активной зоны, подвижные отражатели и т.д. [1, 2]. Возмущения реактивности, вызванные работой этих систем, влияют на управление реактора, процесс стабилизации мощности, работу аппаратуры контроля и т.д., т.е. непосредственно на безопасность и надежность эксплуатации реактора. Полные шумы мощности реактора достигают  $\pm 22\%$  [2]. Анализ шумов мощности ИБР-2М позволяет определять различные изменения и нарушения в работе реактора и диагностировать измененное (нетипичное) состояние реактора на ранней стадии развития дефекта. Поэтому исследование нейтронных шумов на протяжении всей работы реактора имеет большое значение для определения условий его безопасной и надежной работы.

1 Пепельшев Ю.Н., Цогтсайхан Ц. Исследование динамики шумов энергии импульсов реактора ИБР-2М в процессе выгорания топлива. Препринт ОИЯИ Р13-2017-4. Дубна, 2017.

2. Pepelyshev Yu.N., Tsogtsaikhan Ts. Investigation of the Pulse Energy Noise Dynamics at IBR2M Using Cluster Analysis //Annals of Nuclear Energy. 2015. V. 83. P. 50–56.

3. Пепельшев Ю.Н., Рогов А.Д., Цогтсайхан Ц. Статистический анализ флуктуаций энергии импульсов реактора ИБР-2М. Препринт ОИЯИ Р13-2012-131. Дубна, 2012.

## **Физика конденсированного состояния**

## О возможности изучения системы адсорбированного полиакриламида на кремниевую поверхность с помощью рентгеновской и нейтронной рефлектометрии

М. М. Авдеев<sup>1</sup>, А. П. Артикульный<sup>2</sup>, А. В. Шибяев<sup>1</sup>, В. И. Петренко<sup>2</sup>, О. Е. Филиппова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

В настоящее время метод пассивирования поверхности является одним из главных способов подготовки поверхности для использования суперразрешающих флуоресцентных методов. Данный класс методик позволяет изучать структуру и ее эволюцию в различных условиях для биологических объектов (например, белков [Rusmini, Zhong, Feijen, 2007]), молекулярных кластеров (например, липосом [Losey и др., 2009]) и др. Для этого необходима фиксация объектов изучения вблизи поверхности с помощью специальных анкеров. Одной из проблем такого подхода является наличие неспецифичного связывания и взаимодействие объектов с подложкой, поэтому подложка предварительно должна быть покрыта гидрофильным слоем из полимера (толщина порядка 50-200 нм, [Gidi и др., 2018]) или поверхностно-активным веществом (толщина порядка 2-5 нм, [Hua и др., 2014]).

В данной работе рассмотрены системы, в которой на поверхность из раствора осаждается не линейный полимер (ПЭГ или др.), а плотная полимерная сетка на основе полиакриламида (ПАМ). Предполагается, что вблизи поверхности происходит ковалентное прикрепление и полимеризация смеси модифицированных и обыкновенных мономеров ПАМ. В итоге, в системе образуется слой сетчатого полимера, с убывающей плотностью при удалении от поверхности, т.е. мы имеем дело с неоднородным слоем, представляющим собой микрокомпартменты для целевых объектов в его верхней части. Подбирая определенные параметры при мицеллярной сополимеризации (концентрация компонентов, количество ПАВ и др.), мы можем контролировать физическую структуру данного слоя.

Методы рентгеновской и нейтронной рефлектометрии позволяют определять распределение плотности слоя по глубине вблизи границы раздела. Достижение хорошего пространственного разрешения требует достаточного контраста между компонентами системы. Так, в случае нейтронного излучения, возможности расширяются при проведении эксперимента с использованием растворов на основе D<sub>2</sub>O. Целью данной работы является подбор оптимальных параметров синтеза для получения систем, дающих качественные рефлектометрические кривые. Проведен анализ модельных зависимостей в случае высушенной подложки при использовании рентгеновского излучения. Даны модельные зависимости для случая нейтронной рефлектометрии с использованием разной степени дейтерирования раствора. Оценено влияние на кривые отражения набухания полимерного слоя.

1. Gidi Y. и др. Efficient One-Step PEG-Silane Passivation of Glass Surfaces for Single-Molecule Fluorescence Studies // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2018. Т. 10. № 46. С. 39505–39511.

2. Hua B. и др. An improved surface passivation method for single-molecule studies // Nat. Methods. 2014. Т. 11. № 12. С. 1233–1236.

3. Losey E.A. и др. Microplate-Based Analysis of Protein–Membrane Binding Interactions via Immobilization of Whole Liposomes Containing a Biotinylated Anchor // Bioconjug. Chem. 2009. Т. 20. № 2. С. 376–383.

4. Rusmini F., Zhong Z., Feijen J. Protein Immobilization Strategies for Protein Biochips // Biomacromolecules. 2007. Т. 8. № 6. С. 1775–1789.

## Диффузное рассеяние синхротронного излучения в антисегнетоэлектрике цирконат-титанате свинца

Д. А. Андроникова<sup>1</sup>, Ю. А. Бронвальд<sup>1,2</sup>, Р. Г. Бурковский<sup>2</sup>, Д. Ю. Чернышов<sup>3</sup>,  
А. В. Филимонов<sup>2</sup>, С. Б. Вахрушев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> SNBL, European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Цирконат-титанат свинца ( $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ , ЦТС) является широко известным и активно исследуемым функциональным материалом, проявляющим как сегнетоэлектрические, так и антисегнетоэлектрические свойства в зависимости от концентрации титана. До последнего времени наибольший интерес привлекал морфотропный ЦТС ( $x \approx 0.48$ ), демонстрирующий высокие пьезоэлектрические коэффициенты [1]. Однако в последнее время возрастает интерес к антисегнетоэлектрическому ЦТС ( $x < 0.06$ ). Это обусловлено как сложной картиной фазовых переходов, микроскопический механизм которых до конца не установлен, так и появлением новых перспектив в применении антисегнетоэлектрических материалов. Среди них можно отметить электрокалорические системы охлаждения и устройства хранения информации высокой плотности записи.

Известно, что антисегнетоэлектрической ЦТС испытывает два фазовых перехода: из параэлектрической кубической фазы в ромбоэдрическую сегнетоэлектрическую и далее в орторомбическую антисегнетоэлектрическую. Перестройка из параэлектрической в сегнетоэлектрическую фазу сопровождается удвоением элементарной ячейки, предположительно за счет антипараллельных сдвигов атомов свинца [2], а также возникновением несоразмерной модуляции [3]. Структура антисегнетоэлектрической фазы отличается от идеальной кубической наличием антипараллельных смещений ионов свинца, приводящих к учетверению элементарной ячейки относительно кубической, и наличием противofазных вращений кислородных октаэдров, которые в результате удваивают элементарную ячейку в трех направлениях [4].

С целью выявления критических возбуждений, ответственных за наблюдаемую последовательность фазовых переходов, нами были проведены эксперименты по регистрации диффузного рассеяния синхротронного излучения в широком диапазоне температур для монокристаллов ЦТС. Нами был проведен анализ формы диффузного рассеяния и его температурной зависимости для различных точек зоны Бриллюэна. Было установлено, что параэлектрическая фаза характеризуется двумя критическими предпереходными процессами: один связан с критическими флуктуациями поляризации, а второй с неустойчивостью фононной моды, конденсация которой приводит к несоразмерному фазовому переходу.

*Работа Д. Андрониковой поддержана стипендией Президента РФ СП - 3762.2018.5.*

1. Haertling G.H. Ferroelectric ceramics: history and technology // Journal of the American Ceramic Society. 1999. – Вып. 82, №. 4. – С. 797–818.

2. A TEM and neutron diffraction study of the local structure in the rhombohedral phase of lead zirconate titanate / J Ricote, DL Corker, RW Whatmore et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. 1998. – Вып. 10, №. 8. – С. 1767.

3. Dai Xunhu, Xu Zhengkui, Viehland Dwight. Effect of oxygen octahedron rotations on the phase stability, transformational characteristics, and polarization behavior in the lead zirconate titanate crystalline solution series // Journal of the American Ceramic Society. 1995. – Вып. 78, №. 10. – С. 2815–2827.

4. Glazer AM, Roleder K, Dec J. Structure and disorder in single-crystal lead zirconate,  $\text{PbZrO}_3$  // Acta Crystallographica Section B. –1993. – Вып. 49, №. 5. –С. 846–852.

## Структура мицеллярной фазы двухвалентных солей карбоновых кислот

Н. А. Антонова

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В водных растворах при превышении критической концентрации мицеллообразования (ККМ) амфифильные молекулы, в том числе соли карбоновых кислот, образуют мицеллы. Компьютерное моделирование молекулярной динамики концентрированных систем ведёт к появлению рыхлых агрегатов, которые отдалённо напоминают мицеллы. Для компьютерного моделирования широко распространены потенциалы OPLS-AA, CHARMM, AMBER, в которых заряд иона двухвалентного магния равен  $+2e$  и заряд кислотного остатка карбоновых кислот  $-1e$ . Ранее было опубликовано [1], что электрические заряды ионов, заданные в стандартном файле потенциалов атоматомных взаимодействий OPLS-AA, не приемлемы для моделирования концентрированных ионных систем. В продолжение той работы была исследована структура и динамика мицелл в концентрированном растворе гексаноата магния.

Были смоделированы три системы концентрацией 0,61 М и плотностью  $1,04 \text{ г/см}^3$ , каждая состояла из 130 ионов двухвалентного магния, 260 ионов кислотного остатка гексановой кислоты и 10586 молекул воды. Эти системы отличались друг от друга электрическими зарядами ионов. Заряды ионов в системе I были взяты из OPLS-AA, где заряд иона магния равен  $+2e$  и заряд кислотного остатка  $-1e$ . Частичные заряды двух других систем были вычислены квантово-химическим моделированием малой системы, состоящей из катиона, аниона и 10 молекул воды. Метод Малликена приводит к зарядам иона магния  $+1,4e$  и кислотного остатка  $-0,7e$  (система II), метод Лёвдина – к зарядам  $+1e$  и  $-0,5e$  соответственно (система III).

Каждая система моделировалась в течение 3 нс: первая нс отводилась на уравнивание системы и 2 нс анализировались. Для анализа были построены функции радиального распределения. В системе I молекулы воды и магния были очень плотно прижаты друг к другу. Не было обмена молекул воды между гидратной оболочкой магния и свободной водой. Это мешало сближению ионов магния друг с другом. Недиссоциированные молекулы соли существовали объединёнными на протяжении всего моделирования. Аналогичная ситуация была в системе II, в то время как в системе III произошел обмен молекулами воды и существовали контактные пары Mg-Mg (в которых молекула воды стоит сбоку линии Mg-Mg). Этот результат аналогичен результату моделирования Na<sup>+</sup> А. П. Любарцева [2]. Что касается структуры мицелл, чем меньше заряд кислотного остатка, тем больше размеры мицелл в системе.

*Исследования были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра "Вычислительный центр СПбГУ" (<http://cc.spbu.ru>).*

1. Antonova N.A., Ryzhkov A.M., Komolkin A.V. Computer simulation of micelle formation in magnesium hexanoate solution // Magnetic resonance and its applications: Proceedings 16th International School-Conference, Saint Petersburg, 31 марта-05 апреля 2019 г. - СПб: изд-во ООО "Издательство ВВМ", 2019. - С. 130-132

2. Lyubartsev A. P., Laaksonen A. Concentration Effects in Aqueous NaCl Solutions. A Molecular Dynamics Simulation // J. Phys. Chem. - 1996. - Vol.100. - No.40. - P.16410-16418

## Исследование структуры мицеллярных систем водных растворов анионных ПАВ при добавлении полиэтиленгликоля

А. П. Артикульный<sup>1,2</sup>, В. И. Петренко<sup>1,2</sup>, М. В. Авдеев<sup>2</sup>, Л. Алмаши<sup>3</sup>, А. И. Иванов<sup>1</sup>,  
Л. А. Булавин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

<sup>2</sup> Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

<sup>3</sup> Центр физических исследований им. Вигнера, Будапешт, Венгрия

Мицеллярные системы анионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) олеат натрия (ОН) и додецилбензолсульфонатной кислота (ДБСК) используются для создания двухслойной стабилизирующей магнитных наночастиц в водных феррожидкостях. Физикохимические свойства мицеллярных систем также оказывают влияние на структурную организацию агрегатов магнитных частиц в феррожидкости [1]. Свойства биосовместимости феррожидкостей можно улучшить путем добавления полиэтиленгликоля (ПЭГ) в их структуру. В этом отношении полученная многокомпонентная система с мицелл-полимерным буфером имеет тенденцию к реорганизации агрегатной структуры [2]. Настоящая работа посвящена исследованию структурных и взаимодействующих параметров мицеллярных систем ОН и ДБСК под действием добавления водорастворимого нейтрального полимерного ПЭГ.

Тензиометрическим методом было обнаружено формирования ПАВполимерных комплексов. Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) вместе с исследованием поверхностного натяжения позволило нам определить ряд параметров мицелл, включая число агрегации, степень ионизации, морфологию мицеллы и обратную длину экранировки для различных составов смешанных растворов. Из анализа концентрационных зависимостей упомянутые выше параметры для различных соотношений ПАВ/полимер и для разной молекулярной массы ПЭГ (1- 20 кДа) было установлено, что ПАВполимерные комплексы имеют морфологию мицелл близкой к сферической (отсутствует выразительный переход к эллипсоидам), большую степень ионизации (до 25%) и большее значение длины обратного экранирования по сравнению с системами свободных мицелл. Аналогичный эффект экранирования для систем ОН-ПЭГ 1 кДа наблюдался в нашей предыдущей работе [3].

1. Petrenko V.I. et al. On the impact of surfactant type on the structure of aqueous ferrofluids // Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp. 2018. Vol. 541. P. 222–226.
2. Avdeev M. V. et al. Structure of water-based ferrofluids with sodium oleate and polyethylene glycol stabilization by small-angle neutron scattering: Contrast-variation experiments // J. Appl. Crystallogr. International Union of Crystallography, 2010. Vol. 43, № 5 PART 1. P. 959–969.
3. Petrenko V.I. et al. Impact of polyethylene glycol on aqueous micellar solutions of sodium oleate studied by small-angle neutron scattering // Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp. Elsevier, 2015. Vol. 480. P. 191–196.

## Микроструктура и молекулярная подвижность в смесях ионных жидкостей на основе 1-бутил-3-метилимидазолия с водой по данным метода молекулярной динамики

*В. А. Коновалов, А. В. Егоров, В. И. Чижик*

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

Изучение смесей ионных жидкостей (ИЖ) с водой представляет большой интерес как для развития физики жидкого состояния в целом, так и для практического применения в технологических процессах. Однако, несмотря на значительные усилия, предпринятые в данном направлении, целый ряд проблем не решен до сих пор. В настоящей работе, с помощью компьютерного моделирования (метод молекулярной динамики) исследовано влияние присутствия молекул воды на микроструктуру и молекулярную подвижность в смесях ИЖ на основе катиона 1-бутил-3-метилимидазолия с водой.

В работе были рассмотрены 3 ионные жидкости: нитрат, тетрафторборат и йодид 1-бутил-3-метилимидазолия. Для каждой ИЖ моделировалось шесть смесей с различным соотношением компонент (11, 20, 33, 40, 50 и 95 моль% ИЖ), а также три чистые ионные жидкости. Моделирование проводилось с использованием пакета MDynaMix [1] в изотермоизобарическом ансамбле при комнатной температуре и атмосферном давлении. Молекулы воды описывались с помощью двух жестких моделей: пятицентровой TIP5P [2] и трехцентровой SPC/E [3]. Взаимодействия ионов моделировались с использованием потенциалов, описанных в работах [4–7]. Время уравнивания для каждой из рассмотренных систем составляло 0.5 нс, время последующего моделирования – 0.5 нс.

Подробно изучено влияние содержания воды на структурные (функции радиального распределения и координационные числа ионов) и динамические (коэффициенты самодиффузии компонентов и времена переориентации молекул воды) свойства смесей. Отдельное внимание было уделено изучению влияния вида модельных представлений на характеристики исследуемых систем. Предложена модель, описывающая характер изменения структуры смесей при увеличении содержания воды.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 17-03-00057а).*

1. Lyubartsev A. P., Laaksonen A. // *Comp. Phys. Comm.* 2006. V. 128. P. 565.
2. Mahoney W., Jorgensen W. L. // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 891.
3. Berendsen H. J. C., Grigera J. R., Straatsma T. P. // *J. Phys. Chem.* 1987. V. 91. P. 6269.
4. Lopes J. N. C., Deschamps J., Padua A. A. H. // *J. Phys. Chem. B.* 2004. V. 108. P. 2038.
5. Heinzinger K. // *Physica B.* 1985. V. 131. P. 196.
6. Soetens J.-S., Millot C., Maigret B. // *Phys. Chem. A.* 1998. V. 102. P. 1055.
7. Megyes T., Balint S., Peter E., Grosz T., Bako I., Krienke H., Bellissent-Funel M.-C. // *J. Phys. Chem. B.* 2009. V. 113. P. 4054.

## Влияние отношения Si/Al на локальную структуру H-морденитов

*Е. А. Крылова, М. Г. Шеляпина*

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

Каталитические свойства цеолитов обусловлены многими факторами, которые, в свою очередь, зависят от способа получения и начальной формы цеолита [2-3]. Протонная форма морденита, которая имеет более сильные кислотные центры, обычно получается из аммиачной формы путем прокаливания при 300 °С. Известно, что эта процедура приводит к значительной деградации каркаса морденита [4]. Такие локальные разрушения не могут быть обнаружены с помощью дифракции рентгеновских лучей, и для их обнаружения и анализа требуются методы применения, чувствительные к локальной структуре, такие как ядерный магнитный резонанс (ЯМР).

В данной работе изучаются две серии образцов морденита H-MOR-X (X=10, 20, 24, 128) и H-MOR-Y (Y=9.9, 15.0, 15.2, 15.7, 15.8, 18.7, 19.8) с различным отношением Si/Al. Чтобы определить действительный состав, был проведён атомно-эмиссионный спектральный анализ (АЭС), по результатам которого стало ясно, что реальные соотношения примерно на 10 % меньше заявленных.

Результаты экспериментов ЯМР с вращением под магическим углом на ядрах  $^{27}\text{Al}$  и  $^{29}\text{Si}$  свидетельствует о частичном разрушении каркаса. Причём чем больше отношение Si/Al – тем незначительнее эти дефекты.

Размер и морфология образцов были оценены с помощью сканирующего электронного микроскопа. Все образцы представляют собой небольшие кристаллы вытянутой формы (около 200 нм длиной) и объединённые в более крупные агломераты (до нескольких микрометров)

*Исследования проводились на базе ресурсного парка СанктПетербургского государственного университета (РЦ магнитно-резонансные методы исследования, РЦ методы анализа состава вещества и РЦ нанотехнологий) при поддержке гранта РФФИ № 18-53-34004.*

1. Schoonheydt R.A. Catal. Rev. Sci. Eng. 35 (1993) 129–168.
2. Vanelderen P. et al. Coord. Chem. Rev. 257 (2013) 483–494.
3. Zhukov Yuri M. et al. Int. J. Nanotechnol. 13 (2016) 136–146.

## Модель атом-атомных взаимодействий солей карбоновых кислот

*А. М. Рыжков*

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

Для теоретического исследования поведения молекул в жидкостях часто применяется метод молекулярной динамики. Этот метод позволяет рассчитывать пространственные структуры молекул, их взаимное расположение и подвижность. Так же можно отследить конформационные переходы и определить, какое из состояний наиболее выгодное.

При расчете методом молекулярной динамики используется классическое представление о движениях атомов в молекулах, то есть выбирается потенциал взаимодействия частиц, и на каждом шаге моделирования рассчитываются силы взаимодействия атомов, их скорости и энергии. Более точный расчет взаимодействий требует учета квантовой природы частиц.

Для этого используют методы квантовой химии, которые заключаются в нахождении волновой функции состояния системы путем решения стационарного дифференциального уравнения Шрёдингера. Для того, чтобы определить потенциал взаимодействия частиц в методе молекулярной динамики, нужно задать некие экспериментально определенные параметры. Наиболее распространенными параметрами являются: AMBER, CHARMM, OPLS-AA. Заряды ионов во всех параметрах кратны зарядам электронов, например,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $[\text{C}_5\text{H}_{11}\text{COO}]^-$ . В случае органических анионов общий заряд распределяется между атомами кислотного остатка. Такие заряды могут привести к неправильной агрегации амфифильных молекул [1].

В данной работе были проверены различные параметры моделирования. Был произведен квантовомеханический расчет зарядов на ионах солей карбоновых кислот в воде. Для оптимизации геометрии системы, состоящей из одного иона молекулы соли карбоновой кислоты и нескольких молекул воды, использовалась программа Gaussian 16. Были применены следующие методы: RHF с базисом 6-31G++(1d) и DFT с функционалом B3LYP. Для расчета зарядов использовалась программа GAMESS, т. к. в ней есть возможность рассчитать заряды одновременно двумя способами. Заряды считались только методом RHF с базисом 6-31G++(1d). Базис и функционал были выбраны в соответствии с оптимальным балансом между скоростью и точностью вычислений. После расчета зарядов было проведено моделирование для одинаковых систем с разными параметрами. В качестве исследуемых веществ использовались натриевые соли карбоновых кислот, которые в водном растворе диссоциируют на кислотный остаток и ион  $\text{Na}^+$ . Были получены следующие результаты: функции радиального распределения, коэффициенты диффузии и распределение полученных агрегатов по размерам и их форме [2].

*Исследования были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра "Вычислительный центр СПбГУ" (<http://cc.spbu.ru>).*

1. Jönsson B., Edholm O., Teleman O. Molecular dynamics simulations of a sodium octanoate micelle in aqueous solution // The Journal of Chemical Physics.– 1986.- Vol. 85.- No.4.- P.2259- 2271

2. Ryzhkov A.M., Antonova N.A., Komolkin A.V. Analyzing the parameters of atom-atom interactions for Molecular dynamics simulations of micelle formation // Magnetic resonance and its applications: Proceedings 16th International School-Conference, Saint Petersburg, 31 марта-05 апреля 2019 г. - СПб: изд-во ООО "Издательство ВВМ", 2019. - С. 237-240

## Спиновое состояние фрустрированного магнетика $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$

*А. Е. Суслонарова, А. Н. Коршунов, А. И. Курбаков*

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

Семейство  $\text{A}_2\text{MXO}_4$  ( $\text{A} = \text{Li}, \text{Na}, \text{Ag}$ ;  $\text{M} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Zn}, \text{Cd}$ ;  $\text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$ ) кристаллизуется в различные типы структур и демонстрирует разнообразные электрохимические и структурные свойства. Благодаря составу, при котором на один переходный металл приходится два электрона, данная группа соединений является перспективной для использования в электрохимических устройствах. Магнитные свойства не исследовались, а магнитная структура была определена только для двух соединений  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$  и  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ . [1]

Объект исследования – порошок  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ , по данным синхротронной и нейтронной дифракции кристаллизуется в сверхрешётку типа вюрцита ( $\text{ZnO}$ ), пространственная группа  $\text{Pmn}2_1$ . Соединение является слоистым – слои, где внутри кислородных октаэдров находятся ионы лития разделены чередующимися друг с другом тетраэдрами  $(\text{Mn}/\text{Ge})\text{O}_4$ . Такая система является обменно-фрустрированной, из-за наличия конфликта взаимодействий между ближайшими магнитными ионами марганца, при условии наличия антиферромагнитного упорядочения ниже температуры Нееля. [2]

Для определения спинового состояния  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$  проводилась серия экспериментов по нейтронной порошковой дифракции выше и ниже температуры магнитного упорядочения. В результате, на низкотемпературных нейтронограммах было обнаружено появление дополнительных брэгговских отражений, связанных с антиферромагнитным рассеянием нейтронов, а также диффузное магнитное рассеяние выше температуры Нееля, характеризующее наличие спиновых корреляций в магнитной подсистеме.

Теоретико-групповой анализ экспериментальных данных позволил установить тип магнитного упорядочения. Магнитная структура  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$  описывается вектором распространения  $\mathbf{k} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  – магнитная ячейка удвоена по всем кристаллографическим направлениям. Магнитные моменты ионов марганца ориентированы вдоль кристаллографической оси  $c$  под небольшим углом, на что указывает наличие  $x$ -компоненты магнитного момента. Значение магнитного момента, полученное в ходе уточнения равно  $4.24(1) \mu_B/\text{Mn}$ , что хорошо согласуется с теоретическими данными о  $\text{Mn}^{2+}$  в высокоспиновом состоянии ( $S = 5/2$ ).

Из температурных исследований была построена и проанализирована зависимость магнитного момента от температуры. При температуре Нееля 8 К, происходит переход системы из антиферромагнитного состояния в парамагнитное. Насыщение величины магнитного момента ионов марганца не было достигнуто при 1.6 К, а, следовательно, полное упорядочение системы произойдёт при дальнейшем понижении температуры.

В магнитной подсистеме ионов марганца в соединении  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ , реализуется слабый супер-суперобмен с участием катионов лития и германия  $\text{Mn} - \text{O} - (\text{Li}/\text{Ge}) - \text{O} - \text{Mn}$ . При этом, в присутствии антиферромагнитного типа взаимодействия, между ионами марганца такая система становится фрустрированной.

*Исследования выполнено за счёт гранта Российского Научного Фонда, проект №18-12-00375.*

1. Avdeev M., Mohamed Z., Ling C. D. Magnetic structures of  $\beta\text{I}$ -  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$  and  $\gamma\text{0}$ -  $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ : Crystal structure type vs. magnetic topology //Journal of Solid State Chemistry. 2014, 216, 42-48

2. Nalbandyan V. B. et al.  $\text{A}_2\text{MnXO}_4$  Family ( $\text{A} = \text{Li}, \text{Na}, \text{Ag}$ ;  $\text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$ ): Structural and Magnetic Properties //Inorganic chemistry. 2017, 56, 14023-14039

## Магнитные свойства нанонитей на основе железа по данным FORC

*А. Елмекави<sup>1</sup>, С.В. Сотничук<sup>2</sup>, К.С. Напольский<sup>2</sup>, Д. Менцель<sup>3</sup>, А.А. Мистонов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>3</sup> Институт физики конденсированного состояния, Брауншвайг, Германия

Активное исследование магнитного поведения массивов магнитных нанонитей (ММН) обусловлено значимостью таких систем как для фундаментального магнетизма, так и для возможных применений в качестве датчиков магнитного поля [1], магнито-оптических сенсоров [2], а также основы для создания гипертермических элементов для разрушения опухолей [3]. Перспективным также ранее считалось использование ММН для хранения информации, где намагниченность отдельной нити представляла бы собой один бит. Однако существенными препятствиями для корректной записи и считывания информации являются сильные поля размагничивания, создаваемые длинными, но узкими нитями, и прерывистый процесс перемагничивания отдельной нанонити [4, 5] из-за пиннинга движущейся доменной стенки на дефектах структуры. Магнитостатическое взаимодействие между нитями приводит к дальнейшему усложнению процесса перемагничивания [6].

Использование железа позволяет решить вторую проблему, ибо оно обладает низкой анизотропией кристаллической решетки (кубической, в отличие от гексагональной у кобальта), но в то же время высоким магнитным моментом (по сравнению с никелем).

В данной работе были исследованы массивы нанонитей железа, имеющие одинаковый диаметр и расстояние между нитями, но различающиеся по длинам нитей, синтезированные методом темплатного электроосаждения. В качестве темплатов использовали пористые плёнки анодного оксида алюминия (АОА) толщиной 35 мкм, полученные с помощью двухстадийного анодирования алюминия. Электроосаждение железа проводили при комнатной температуре в трехэлектродной ячейке.

Исследование магнитных свойств проводилось методом SQUID и first-order reverse curves (FORC). В результате была выявлено немонотонное изменение магнитных параметров с увеличением длины нити. Поле прикладывалось как вдоль, так и поперёк длинной оси нанонитей.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №18-72-00011).*

1. Atalay, S., Kaya, H., Atalay, F.E. et al. J Supercond Nov Magn (2019).  
<https://doi.org/10.1007/s10948-019-05160-2>
2. ACS Appl. Nano Mater.20181105742-5752
3. Colloids and surfaces. B, Biointerfaces, ISSN: 1873-4367, Vol: 180, Page: 401-410
4. Vázquez, M., Vivas, L. G., Physica status solidi (b), 248(10), 2368-2381 (2011);
5. Ivanov, Y et al., Journal of Physics D: Applied Physics, 46(48), 485001 (2013);
6. Zighem, F. et al., Journal of Applied Physics, 109(1), 013910 (2011).



## Низкочастотный одноэлектродный разряд в длинных трубках: его свойства и механизм формирования

А. И. Шишпанов, П. С. Бажин, Д. О. Иванов, С. А. Калинин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Исследовалась новая низкочастотная форма одноэлектродного разряда (ОЭР) в длинных разрядных трубках [1], которая возникает при подаче высоковольтных импульсов на один электрод; второй электрод либо остается не подключенным к внешней цепи, либо отсутствует. ОЭР возникает в тех же условиях, что и тлеющий разряд и может найти применение в плазмохимии, оптике и обработке материалов. В отличие от известных форм емкостных разрядов, ОЭР в длинной трубке возникает при низкой частоте импульсов напряжения  $\sim 1-1000$  Гц. При этом механизм разряда отличается от ВЧ случая, т.к. ионизация поддерживается не вкладом электромагнитной энергии генератора в раскачку электронов, а многократным пробоем газа, который успевает между импульсами деионизоваться. Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию ОЭР в запаянных трубках длиной 1 м, наполненных неоном и аргоном до давления 4 Торр. Разряд формировался прямоугольными импульсами напряжения амплитудами  $U$  от 1,1 до 3,7 кВ обеих полярностей, которые прикладывались к одному электроду с частотой 5 Гц – 10 кГц. ОЭР наблюдается как светящаяся область плазмы, занимающая все поперечное сечение, а по длине либо всю трубку, либо ее часть. Длина ОЭР ( $L$ ) зависит от сорта газа, давления, приложенного напряжения и его частоты. Существует минимальное значение  $L_m$ , (3-4 см для ОЭР положительной полярности, 2 см при отрицательной), которой соответствует минимальное напряжение горения  $U_{min}$ . ОЭР возникает при напряжении пробоя  $U_b$ ; в этой точке ВАХ испытывает резкий подъем, а мощность, вкладываемая в разрядный промежуток, начинает быстро нарастать. При этом всегда  $U_b > U_{min}$ .

Исследован механизм ОЭР, который состоит в многократном (с частотой импульсов) прохождении по трубке волн ионизации (ВИ) [2]. ВИ генерируется у поверхности электрода при подаче импульса напряжения. ВИ состоит из заряженного фронта, несущего высокий потенциал и плазменного канала, соединяющего фронт с электродом. Свечение канала, интегрированное глазом по времени, воспринимается как свечение ОЭР. Обнаружен затухающий характер движения ВИ и выявлен его закон. Показано, что затухание связано с экспоненциальным снижением потенциала заряженного фронта по мере его удаления от электрода. Именно этот процесс приводит к ограничению длины ОЭР и ее зависимости от  $U$ , которая может быть представлена формулой:  $L = L_m + (1/\alpha) \ln(U/U_{min})$ , где  $\alpha$  – коэффициент затухания потенциала ВИ. Получены данные по зависимости  $\alpha(U)$  в неооне и аргоне, произведены оценки напряженности электрического поля в канале ОЭР и концентрации электронов, средние значения которых составили:  $E^{10}$  В/см,  $n_e 10^8 - 10^{10}$  см<sup>-3</sup>. Прохождение ВИ создает неоднородность концентрации электронов по длине разряда, которая приводит к самоорганизации плазменных структур. В частности в ОЭР в неооне легко наблюдаются стоячие страты, которые не возникают в тлеющем разряде при тех же условиях.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-32-00223.*

1. Meshchanov A.V., Ivanov D.O., Ionikh Y.Z., Shishpanov A.I. // J. Phys. D: Appl. Phys., 2018. N51. P. 334202

2. Gendre M.F., Haverlag M., Kroesen G.M.W. // J. Phys. D: Appl. Phys., 2010. N43. P. 234004

# **Теоретическая физика**

## Нерезонансные поправки для прецизионных измерений частоты $2s-4p$ перехода в атоме водорода

*А. А. Аникин*

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

Ввиду недавних сверхточных спектроскопических измерений частот переходов между энергетическими уровнями в атоме водорода, большое внимание оказывается теоретическим исследованиям все более «тонких» эффектов, имеющих влияние на определение частоты. Многие из сверхточных спектроскопических измерений связаны с процессом рассеяния фотона на связанном электроны. При анализе этого процесса в [1] было получено наиболее общее выражение для сечения рассеяния фотона на атоме водорода в зависимости от всех квантовых чисел, включая сверхтонкую структуру. Согласно теории, разработанной Лоу [2], был предложен метод контура спектральной линии [3,4]. В рамках данного метода при описании процесса рассеяния можно определить нерезонансные поправки к частоте рассматриваемого перехода [5,6]. Учет таких поправок становится необходимым при столь точных измерениях [7]. В частности оказалось, что эти поправки зависят от типа эксперимента: фиксировано ли начальное (или конечное) направление вылета фотона или начальное (или конечное) направление его поляризации. В работе [1] показано, что частота перехода перестает носить универсальный характер: она становится зависимой от геометрии эксперимента (с фиксированным начальным/конечным направлением фотона или его поляризации), а также является конечное состояние атома фиксированным или нет. Данная работа посвящена детальному анализу экспериментов типа [7].

1. D.Solovyev, A.Anikin, T.Zalialiutdinov and L.Labzowsky, archive 1906.06587 [physics.atom-ph] 15 Jun 2019

2. F. Low, Phys.Rev. 88, 1951

3. O. Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G.Plunien and D.A. Solovyev, Phys.Rep. 455, 135-246 (2008)

4. T.A.Zalialiutdinov, D.A. Solovyev, L.N.Labzowsky and G.Plunien, Phys.Rep. 737, 1-84 (2018)

5. L. Labzowsky, V. Karasiev, I. Goidenko, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27, 1994.

6. L.N.Labzowsky, D.Solovyev, G.Plunien et al. Phys.Rev.Lett. 87, 2001. 143003 p.

7. A.Beyer, L.Maisenbacher, A.Matveev et al. Science 358, 2017

## Рассеяние на примеси в квантовой нити с электрон-фононным взаимодействием: непертурбативная фермионная ренормгруппа

Р. А. Ниязов<sup>1</sup>, П. А. Носов<sup>1,2</sup>, Д. Н. Аристов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Одномерные квантовые системы с электрон-фононным взаимодействием интенсивно исследуются из-за своих примечательных транспортных свойств и возможности практического воплощения. Недавно обсуждалось влияние этого взаимодействия на кондактанс (коэффициент прохождения) краевых геликоидальных состояний двухмерных топологических изоляторов [1]. Отмечалось, что неупругие процессы рассеяния, возникающие из-за наличия фононов, сохраняют симметрию по отношению к обращению времени и могут значительным образом влиять на топологически защищенные транспортные свойства. Подобные процессы (например, наличие спин-орбитального взаимодействия [2], спин-поляризованного зонда [3]) могут приводить к обратному рассеянию электронов, что проявляется в изменении кондактанса квантовой нити или даже в появлении новой стационарной точки на фазовой диаграмме ренормгрупповых потоков.

Известно, что наличие примеси в квантовой нити при учете электрон-электронного взаимодействия приводит к уменьшению кондактанса по степенному закону в зависимости от температуры. Для исследования этого явления используют два теоретических подхода: бозонизация и фермионный подход. Первый учитывает эффекты взаимодействия точно, но описывает поведение кондактанса только вблизи его предельных значений (идеальное прохождение или полное отражение). Второй подход учитывает взаимодействие по теории возмущений, но работает для всех значений кондактанса. Кроме того, его возможно значительно улучшить, просуммировав определенную подпоследовательность ряда теории возмущений и воспроизвести степенные показатели кондактанса точно, в полном согласии с результатами бозонизации [4].

В данной работе впервые было выполнено это суммирование для учета электрон-фононного взаимодействия. Были воспроизведены известные раньше результаты, полученные в подходе бозонизации вблизи предельных значений кондактанса. Кроме того, изучено поведение кондактанса для промежуточных значений. Получено, что, меняя коэффициент прохождения фононов, можно управлять прозрачностью контакта для электронов. Например, при определенных значениях параметров предельное значение прозрачности меняется от полного отражения до идеального прохождения при увеличении коэффициента прохождения фононов. В дальнейшем, развитый подход планируется использовать для анализа стыков квантовых нитей, в том числе, при участии геликоидальных состояний.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00424.*

1. S. Groenendijk, G. Dolcetto, T. L. Schmidt, Phys. Rev. B 97, 241406 (2018).
2. J. C. Budich, F. Dolcini, P. Recher, B. Trauzettel, Phys. Rev. Lett. 108, 086602 (2012).
3. D. N. Aristov, R. A. Niyazov, Europhysics Letters 117, 27008 (2017).
4. D. N. Aristov, P. Wölfle, Phys. Rev. B 80, 045109 (2009).

## Туннелирование в Латтинжеровскую жидкость с электрон-фононным взаимодействием в режиме сильной связи

П. А. Носов<sup>1,2</sup>, Р. А. Ниязов<sup>1</sup>, Д. Н. Аристов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В последнее время интерес к роли электрон-фононного взаимодействия в Латтинжеровской жидкости значительно усилился в связи с исследованиями электронного транспорта в геликоидальных краевых состояниях топологических изоляторов [1, 2]. В таких экзотических направлении распространения электронов на границе жестко связано с направлением их спина соединениях за счет сильного спин-орбитального взаимодействия, что запрещает прямое рассеяние назад. В таком случае неупругие процессы рассеяния на фононах, не нарушающие симметрии относительно обращения времени, могут кардинальным образом повлиять на свойства проводимости. Известно, что подобного рода диссипативные механизмы могут эффективно индуцировать рассеяние назад в присутствии примеси типа Рашбы [1] или спин-поляризованного туннельного зонда [3], что также теоретически может приводить к возникновению новых нетривиальных стационарных точек ренорм-группового потока.

В данной работе нами было изучено влияние электрон-фононного взаимодействия на перенормировку кондактансов в Y-стыках Латтинжеровских жидкостей в режиме сильной связи. Такая постановка задачи соответствует геометрии эксперимента по сканирующей туннельной микроскопии одномерных квантовых систем, например углеродных нанотрубок или краевых состояний топологических изоляторов. Система демонстрирует конкуренцию между кулоновским отталкиванием и притягивающим взаимодействием через фононы. В дополнение к этому были учтены нелокальные эффекты, связанные с распространением фононов через примесь с произвольными коэффициентами отражения и прохождения. В рамках фермионного подхода с применением Келдышевской диаграммной техники нам удалось просуммировать бесконечную последовательность лестничных диаграмм, определяющих скейлинг кондактансов во всех порядках теории возмущений по электронфононному взаимодействию. Показано, что данное суммирование соответствует интегральному уравнению типа Виннера-Хопфа, решение которого для электрон-фононного взаимодействия было получено нами аналитически в замкнутой форме. Полученные ренорм-групповые уравнения не только находят превосходное согласие с известными в литературе предельными случаями [4,5], но также существенно расширяют имеющиеся результаты т.к. позволяют вычислить скейлинговые показатели в непертурбативном режиме.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00424. 107*

1. J. C. Budich, et. al., Phys. Rev. Lett. 108, 086602 (2012).
2. S. Groenendijk, et. al., Phys. Rev. B 97, 241406 (2018).
3. D. N. Aristov and R. A. Niyazov, Europhysics Letters 117, 27008 (2017).
4. D.N. Aristov and P. Wölfle, PRB 84, 155426 (2011).
5. I. V. Yurkevich, et. al., Phys. Rev. Lett. 110, 136405 (2013).

## **Сервис для запуска параллельных приложений по расчету систем длинных и коротких джозефсоновских переходов на ресурсах МИВК**

*И. А. Соколов, Н. А. Балашов, Н. А. Кутовский*

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Облачные вычисления стали обычным инструментом используемым учеными во многих областях. Пользователям ОИЯИ предоставляется многофункциональный информационно-вычислительный комплекс (МИВК), включающий в себя различные вычислительные ресурсы ОИЯИ, для выполнения широкого спектра научных расчетов. Для ускорения выполнения научных расчетов, а также упрощения запуска однотипных задач, но с использованием различных ресурсов МИВК, был разработан облачный сервис ОИЯИ для запуска параллельных приложений. Он состоит из нескольких компонентов и реализует гибкую и модульную архитектуру, которая позволяет запускать большое количество задач на различных типах вычислительных архитектур [1, 2]. Сервис постоянно развивается и совершенствуется на основе отзывов пользователей. Примером использования сервиса в научных вычислениях является исследование сверхпроводящих процессов в уложенных длинных джозефсоновских переходах (LJJ). Системы LJJ подвергаются интенсивным исследованиям из-за перспективы практического применения в наноэлектронике и квантовых вычислениях. Реализация расчётов системы LJJ используется в качестве одного из приложений сервиса [3].

1. Baranov A.V., Balashov N.A., Kutovskiy N.A., Semenov R.N. JINR cloud infrastructure evolution // PPNL 13, 2016. – No. 5. – p. 672.

2. Alexandrov E.I. et al. Research of Acceleration Calculations in Solving Scientific Problems on the Heterogeneous Cluster HybriLIT // RUDN JMISP 4, 2015. – p. 30.

3. Башашин М.В., Земляная Е.В., Рахмонов И.Р., Шукринов Ю.М., Атанасова П.Х., Волохова А.В. Вычислительная схема и параллельная реализация для моделирования системы длинных джозефсоновских переходов // Компьютерные исследования и моделирование, 2016. – Т. 8. – № 4. – С. 593-604.

## Global embeddings of BTZ and Schwarzschild-AdS metrics and their geometric properties

*D.P. Solovyeu, A.A. Sheykin, S.A. Paston*

*Saint Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

Isometric embedding is a representation of a pseudo-Riemannian manifold as a surface in a ambient space (usually flat) of higher dimension, induced metric of which coincides with the metric of the manifold. For metrics with high enough symmetry (e.g. black holes [1] or cosmological models) these embeddings can be constructed using the method based on the representation theory of the symmetry group of the metric and Poincare group of the ambient spacetime [2].

The problem of construction of global isometric embedding arises, in particular, in the description of gravity as the Regge-Teitelboim embedding theory [3]. In this approach, the dynamics of gravity is considered as dynamics of curved surface isometrically embedded in flat ambient space. This theory can shed some light on various physically relevant metrics and their non-Einsteinian modifications. Globality of embeddings is crucial as the embedding function can be considered as a physical variable [3] and be helpful for analysis of thermodynamic properties of manifolds with horizons (see [4-6]).

The talk is devoted to construction and analysis of the global minimal embeddings of static black holes with negative cosmological constant in the background, mainly BTZ and Schwarzschild-AdS black holes. We study various embeddings of these metrics [7] and explore their possible applications to physics and geometry.

1. A.A. Sheykin, S.A. Paston. *Theor.Math.Phys.* 185 (2015), 1547-1556, arXiv:1512.08280.
2. S. A. Paston, A. A. Sheykin. *Class. Quant. Grav.* 29, 095022 (2012), arXiv:1202.1204.
3. T. Regge, C. Teitelboim, "General relativity à la string: a progress report", in *Proceedings of the First Marcel Grossmann Meeting, Trieste, Italy, 1975*, edited by R. Ruffini, 77–88, North Holland, Amsterdam, 1977, arXiv:1612.05256.
4. S. A. Paston. *JHEP* 06, 122 (2014), arXiv:1402.3975.
5. S. A. Paston. *Class. Quant. Grav.* 32, 145009 (2015), arXiv:1411.4329.
6. S. A. Paston. *Theor. Math. Phys.* 185:1, 1502-1515 (2015), arXiv:1512.08746.
7. A.A. Sheykin, D.P. Solovyeu, S.A. Paston. *Symmetry* 11, 841 (2019), arXiv:1905.10869.

## The isometric embedding of the Godel metric

*Ya.A. Fedulov, A.A. Sheykin, S.A. Paston*

*Saint Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

Nowadays the General Relativity is treated by most of the physicists as the best-proven theory of gravitational interaction. Its remarkable feature is the fact that the presence of the gravitational field is described as the curvature of the spacetime. It thus raises a question about the most convenient way of the representation of curved spacetimes.

One of such representations, which possesses several doubtless advantages, is an isometric embedding. In this approach the curved space is defined as a surface in an ambient space of higher dimension, which is usually assumed to be flat. It is often helpful in the investigation of the geometric structure of embedded spacetime [1,2] as well as its physical properties (e.g. embeddings can be of use in the calculation of the thermodynamic characteristics of the manifolds with a horizon)[3,4].

There is no regular way to obtain an explicit embedding of the generic 4- dimensional spacetime. However, when the spacetime has a high enough symmetry (which is the case for many physically interesting metrics), there is an algorithm, which allows to construct and classificate all possible types of surfaces which have the same symmetry [5].

Godel metric is the one of the most famous and peculiar solutions of the Einstein equations. It is well-known as the one of the first examples of the Einsteinian spacetimes with the causality violation, as it possesses closed timelike curves [6]. It has a 5-parametric symmetry group, so the abovementioned method could be of use.

In this talk we discuss the construction of isometric embedding for the Godel metric and possible applications of this embedding to the study of its structure.

1. H. Stephani et al. Exact Solutions of Einstein's Field Equations (2nd ed). CUP, 2009.
2. H. Goenner. Local isometric embedding of riemannian manifolds and Einstein's theory of gravitation // General Relativity and Gravitation: One Hundred Years after the birth of Albert Einstein, ed. by A. Held, New York: Plenum Press, 1980, vol. 1, p. 441–468.
3. S. Deser, O. Levin. Phys. Rev. D 59, 064004 (1999), arXiv:hep-th/9809159.
4. S. A. Paston. Class. Quant. Grav. 32, 145009 (2015), arXiv:1411.4329.
5. S. A. Paston, A. A. Sheykin. Class. Quant. Grav. 29, 095022 (2012), arXiv:1202.1204.
6. M. Roman, Ph. Spindel. Class. Quant. Grav. 15, 3241-3249 (1998).

## Стык из трех квантовых проволок: теория поля, критическое поведение и применимость аппроксимаций

*Л. В. Штаркман, В. Ю. Петров*

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

Одним из приложений теории одномерных взаимодействующих фермионов являются квантовые проволоки. Фермионы внутри проволоки описываются моделью Латтинджерской жидкости. Для беспримесных проволок проводимость может быть получена как с помощью точного решения, так и используя бозонизацию. Однако эти подходы усложняются с введением проволоку примеси. Основываясь на точном решении для проволоки без примеси, можно найти явно функцию Грина для соединения из нескольких проволок и получить полную эффективную теорию. Результат для двух проволок был получен данным методом [1].

Мы расширили метод явного решения на случай трёх проволок, который является альтернативой “roog man” ренормализационной группе [2] (и бозонизации). Эффективная теория соединения проволок была проанализирована методами ренормгруппы до четвёртого порядка (четвёртой петли). В этой теории вычислена проводимость системы в первом порядке по взаимодействию между электронами (в одной петле) и найдены критические точки, в которых система будет находиться при постоянном внешнем напряжении. Результаты получены с большей точностью по сравнению с бозонизацией и “roog man” подходом, а также помогают лучше понять особенности приближений “roog man” ренормгруппы.

1. V.V. Afonin and V.Y. Petrov Luttinger liquid with one impurity: equivalent field theory and duality *Pis'ma v ZhETF* 97 (2013), 587.

2. D.N. Aristov and P. Wölfle, Chiral Y-junction of Luttinger liquid wires at strong coupling: fermionic representation *Physical review. B, Condensed matter* 88(7) (2013)

## Исследование спектра спиновых волн в антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость»

А. С. Щербаков<sup>1</sup>, О. И. Утёсов<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Квантовый магнетик  $\text{NiCl}_2\text{-}4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ , сокращенно называемый DTN (dichloro -tetrakis-thiourea-nickel), является объектом многочисленных исследований. Это вещество образует объемноцентрированную тетрагональную решетку с четкой иерархией констант обменного взаимодействия. Самым сильным обменом оказывается обмен вдоль оси с тетрагональной решеткой, делая DTN квазиодномерным объектом. При низких температурах и наличии внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси с тетрагональной решеткой, DTN испытывает последовательно два квантовых фазовых перехода. Первый переход из парамагнитной фазы в антиферромагнитную фазу (АФ), второй переход из АФ в полностью поляризованную фазу.

При допировании этого вещества бромом происходит частичная замена атомов хлора на атомы брома. Атомы брома, хотя и большие по размеру по сравнению с атомами хлора, не изменяют сильно межатомные расстояния, что не приводит к заметным искажениям симметрии решетки. Поэтому DTN является удобным объектом для исследования влияния беспорядка в константах взаимодействия на свойства квантовых магнетиков и в целом физики разупорядоченных бозонных систем. Фитирование спектра неупругого рассеяния нейтронов показывает, что увеличение концентрации брома приводит к увеличению констант обменного взаимодействия и одноионной анизотропии [1]. В то же время увеличение концентрации брома приводит к уменьшению щели экспериментах по спиновому резонансу (ESR) в АФ [2].

Целью работы было теоретическое исследование спектров магнонов в магнитоупорядоченной фазе и сравнение с экспериментальными результатами спинового резонанса. Для анализа спектра магнонов использовалось стандартное представление спиновых операторов Холстейна-Примакова и теория возмущений по параметру  $1/S$ .

В данной работе было показано, что при учете квантовых флуктуаций в первом порядке по  $1/S$  появляется нелинейная зависимость спектра от параметров и появляется возможность заработать уменьшение щели в спектрах, при увеличении параметров модели. Полученные результаты имеют хорошее качественное совпадение с результатами ESR [2,3] и устраняют противоречие между данными ESR [3] и экспериментом по неупругому рассеянию нейтронов [1].

1. K. Yu. Povarov, E. Wulf, D. Hüvonen, J. Ollivier, A. Paduan-Filho, and A. Zheludev Phys. Rev. B 92, 024429, 2015

2. Zvyagin S. A. et al. Spin dynamics of  $\text{NiCl}_2\text{-}4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$  in the field-induced ordered phase //Physical Review B. – 2008. – Т. 77. – №. 9. – С. 092413.

3. A.I. Smirnov, unpublished

## **Материаловедение и новые материалы**

## Исследование процессов модификации полиимидных систем для создания препрегов на основе непрерывного углеродного волокна

А. С. Егоров<sup>1</sup>, М. В. Богдановская<sup>1</sup>, Д. С. Гудеева<sup>1</sup>, Н. М. Чалая<sup>2</sup>, В. Н. Ивашкина<sup>3</sup>,  
В. С. Осипчик<sup>3</sup>, Н. Г. Павлюкович<sup>4</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, Москва, Россия

<sup>2</sup> АО «МИПП – НПО «Пластик», Москва, Россия

<sup>3</sup> РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

<sup>4</sup> ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

В работе предложен альтернативный способ получения препрегов на основе углеродного волокна (УВ), используемых для создания термически устойчивых размеростабильных, высокопрочных конструкций при помощи метода 3D-печати. На первом этапе двухстадийной пропитки с волокна удаляли заводской аппрет, после чего наносилась подходящая (для термостойкого адгезива) аппретирующая композиция, представляющая собой раствор сополимера, олигомера или мономера с изоцианатными группами. Затем, полученное волокно пропитывали раствором реакто- или термопластичного полимера, путём протяжки волокна через пропиточный раствор, как описано в патенте [1].

Основу используемых аппретирующих составов составляли органорастворимые полимеры и сополимеры, включающие диангидриды 3,3',4,4'-дифенилоксида тетракарбоновой кислоты, 3,3',4,4'-бензофенон тетракарбоновой кислоты и 2,2-бис-(3,4-дикарбоксифенил)-гексафторпропанового ангидрида.

Пропиточные составы представляли собой растворы полиимидных матриц различной природы, которые были синтезированы в ходе работы, в высококипящих полярных растворителях, содержащих различные модифицирующие добавки, улучшающие эксплуатационные характеристики растворов.

Было выяснено, что введение полисилоксан–полиоксиалкиленовых блоксополимеров (ПСПЭ) значительно понижает вязкость системы, что улучшает её технологические свойства и оказывает положительное влияние на пропитку УВ. Для исследования влияния модификаторов на поверхностное натяжение пленок, полученных из полиимидных матриц, образцы изготавливались методом многоступенчатой имидизации. Показано, что присутствие в полимерной матрице ПСПЭ совместно с циклокарбонатами приводит к увеличению значений полярной составляющей поверхностного натяжения и улучшает адгезию между УВ и связующим [2].

Также, было оценено влияние модифицирующих добавок на физикомеханические свойства полученных пленок. Было установлено, что введение в полимерную матрицу поливинилформальтилаля увеличивает деформационнопрочностные показатели пленок за счет образования поперечных связей [2].

Таким образом, в ходе выполнения проекта были разработаны аппретирующие и пропитывающие полимерные составы и было определено влияние модифицирующих добавок на их технологические и физикомеханические свойства.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках Договора № 18-29-18087\18 о предоставлении гранта победителю конкурса и реализации научного проекта.*

1. Егоров А.С., Возняк А.И., Иванов В.С., Царькова К. В. Антипов А. В. Способ получения полиимидного композитного волокна на углеродной основе, армированного наноструктурированным карбидом кремния // Патент RU2644906C2

2. Егоров А.С., Чалая Н.М., Крамарев Д.В., Осипчик В.С., Ивашкина В.Н. Исследование процессов модификации полиимидных систем, предназначенных для создания композиционных многослойных материалов // Пластические массы. 2019;(5-6):6-8

## Плазмон-поляритоны на поверхности метаматериала

О. В. Иванникова<sup>1,2</sup>, А. А. Тищенко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

В настоящее время физика метаматериалов представляет собой одну из наиболее перспективных и быстро развивающихся отраслей науки. Интерес к метаматериалам обусловлен возможностью создания искусственных структур, обладающих широким спектром свойств, которые не характерны для существующих в природе материалов. Краевые задачи играют важную роль в исследовании метаматериалов, так как явления на границе оказывают сильное воздействие на свойства метаматериала и открывают возможности для синтеза структур, определяемых граничными поверхностями [1-3].

В настоящей работе были исследованы характеристики плазмонполяритонов на поверхности метаматериала с учетом естественного изменения поляризации приповерхностного слоя, обусловленного асимметрией в формировании локальных полей, действующих на частицы приповерхностного слоя. Получено условие существования плазмон-поляритонов на поверхности метаматериала. Определены частотные щели для метаматериала лоренцевского типа. В частном случае немагнитной среды дисперсионные соотношения переходят в ранее опубликованный результат, см. работу [4].

Рассчитанный спектр поверхностных волн на границе метаматериала важен для определения условий возбуждения и распространения таких волн. Это открывает новые возможности для разработки и конструирования метаматериалов с заданными свойствами, которые могут быть использованы для разработки новых оптических устройств на основе метаматериалов.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18- 32-00662.*

1. I.V. Lindell, A.H. Sihvola, Electromagnetic boundary and its realization with anisotropic metamaterial, Phys. Rev. E 79, 026604 (2009).

2. O.V. Porvatkina, A.A. Tishchenko, M.N. Strikhanov, Permittivity and permeability of semiinfinite metamaterial, Permeability tensor for a metamaterial adjacent to a metal, Appl. Phys. A 123, 2 (2017).

3. N.V. Ilin, A.I. Smirnov, I.G. Kondratiev, Features of surface modes in metamaterial layers, Metamaterials 3, 82 (2009).

4. М.И. Рязанов, Влияние естественного изменения поляризации приповерхностного слоя на электромагнитные поверхностные волны, ЖЭТФ 110, 959 (1996).

## **Влияние биогенных наночастиц сульфида кадмия на физико-химические свойства полимерных нанокомпозитов**

***Е. В. Иванов<sup>1</sup>, А. С. Егоров<sup>1</sup>, Е. А. Чигорина<sup>1</sup>, В. М. Ретивов<sup>1</sup>, Е. И. Кожухова<sup>1</sup>, Т. А. Воейкова<sup>2</sup>, О. А. Журавлева<sup>2</sup>, В. С. Кулигин<sup>2</sup>, В. Г. Дебабов<sup>2</sup>***

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, Москва, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ГосНИИгенетика, Москва, Россия

В соответствии с Программой взаимодействия с другими организациями, входящими в состав НИЦ «Курчатовский институт», были проведены совместные исследования НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА и НИЦ «Курчатовский институт» – ГосНИИгенетика по оценке взаимодействия биогенных наночастиц и различных полимерных материалов. Наночастицы NpCdS получены микробным синтезом с использованием штаммов *Bacillus subtilis* и *Shewanella oneidensis*, содержат на поверхности различные белковые молекулы, что определяет их стабильность в водных суспензиях. Наночастицы являются квантовыми точками с размером до 5 нм, сферической формы и определены как метастабильные коллоидные водные системы. Целью исследования являлось создание полимерных композитов, модифицированных биогенными наночастицами.

Для введения наночастиц в полимерные матрицы необходимо оценить интенсивность люминесценции NpCdS в диапазоне концентраций, влияние органических растворителей и других физико-химических факторов на устойчивость водных суспензий наночастиц, определить принципы подбора полимерных матриц, необходимые для создания полимерных биокомпозитов.

Проведена оценка интенсивности люминесценции NpCdS в зависимости от концентрации наночастиц в образце. Установлен диапазон концентраций наночастиц в водной суспензии, определяемый с помощью спектрофлуориметра «Флюорат-02-Панорама».

Для технологического процесса создания биокомпозита требуется анализ влияния растворителей на стабильность биогенных наночастиц и интенсивность люминесценции. Были использованы диметилформамид (ДМФА), диметилсульфоксид (ДМСО), ацетон, N-метилпирролидон (N-МП). Образования агломератов не происходило, выпадения осадка не наблюдали, система оставалась стабильной, были зарегистрированы спектры люминесценции. Наночастицы, добавленные в различные растворители, показывали люминесценцию в диапазоне длин волн 300-400 нм, но с разной интенсивностью сигнала. Максимальными значениями интенсивности сигнала обладали системы N-МП-водная суспензия NpCdS и ДМФА-водная суспензия NpCdS.

Были проведены эксперименты по получению нанокомпозитов на основе полимерных матриц различной природы с биогенными NpCdS в качестве наполнителя. При подборе матриц необходимо учитывать интенсивность люминесценции полимера, которая не должна превышать уровень излучения нанонаполнителя. В качестве матрицы использовали эпоксидную смолу «L» с отвердителем GL-1, раствор полиимида и поливиниловый спирт. Спектры люминесценции «чистых» полимерных пленок и с введенными наночастицами не показали различий по расположению пиков, что говорит о поглощении полимерной матрицей света с возбуждающей длиной волны 270 нм. Полученные результаты свидетельствуют о необходимости дальнейшей разработки методики и оценке взаимодействия биогенных наночастиц и различных полимерных материалов.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-04-00088.*

## Спеченные материалы на основе высокодисперсных смесей тугоплавких карбидов и боридов

*Т. В. Коцарь, С. С. Орданьян*

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

Ранее в [1] был описан совместный синтез высокодисперсных смесей тугоплавких карбидов и боридов в системах  $B_4C-SiC-MB_2$ , где  $M - Ti, Zr$ , путем карботермического восстановления стеклокристаллических прекурсоров в системе  $B_2O_3-SiO_2-M_xO_y$ . Синтезированные смеси являются продуктом высокой дисперсности, преимущественно представлены частицами двух типов: кристаллами преобладающего компонента размером до 5 мкм, окруженными мелкими частицами в диапазоне размеров 30-500 нм. Для трехкомпонентного образца  $B_4C-SiC-TiB_2$  кристаллы карбида бора ограничены размером 1 мкм, средний размер частиц мелкой фракции составляет 30-40 нм.

На основе совместно синтезированных порошковых смесей бескислородных соединений были спечены материалы, продемонстрировавшие современный и более высокий уровень физико-механических характеристик в сравнении с материалами-аналогами, представленными в работах [2-3]. В частности, образец состава  $B_4C:SiC:TiB_2=51,2:40,7:8,1$  (мол. %), полученный методом электроимпульсного плазменного спекания в вакууме при нагреве до 1600 °С, обладает повышенной характеристикой трещиностойкости (~5,9 МПа·м<sup>1/2</sup>). Образцы с диборидом циркония были спечены горячим прессованием в аргоне при нагреве до 2000 °С и изотермической выдержке в течение 15 минут при давлении 30 МПа. Образец состава  $B_4C:SiC:ZrB_2=5,8:36,6:57,6$  (мол. %) показал средний уровень свойств сравнительно с аналогом. Твердость по Виккерсу, модуль упругости и коэффициент трещиностойкости экспериментального образца  $ZrB_2-ZrC$  в среднем составили 26,5 ГПа, 543 МПа и 5,9 МПа·м<sup>1/2</sup> соответственно.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01281\19.*

1. Коцарь, Т. В. Стеклокристаллические прекурсоры в системах  $B_2O_3-SiO_2-M_xO_y$ , где  $M - Ti, Zr, Cr$ , как источник получения высокодисперсных смесей тугоплавких карбидов и боридов / Т. В. Коцарь, Д. П. Данилович, С. С. Орданьян // «Open Science 2018»: сборник тезисов V ежегодного всероссийского молодежного научного форума, 21–23 ноября 2018 г. – Ленинградская обл., г. Гатчина : НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ. – 2018. – С. 170-172.

2. Li, W.-J. Preparation of directionally solidified  $B_4C-TiB_2-SiC$  ternary eutectic composites by a floating zone method and their properties / W.-J. Li, R. Tu, T. Goto // Mater. Trans, JIM. – 2005. – Vol. 46, № 9. – P. 2067-2072. 3. Zhang, S. C. Pressureless sintering of  $ZrB_2-SiC$  ceramics / S. C. Zhang, G. E. Hilmas, W. G. Fahrenholtz // J. Amer. Ceram. Soc. – 2008. – Vol. 91, № 1. – P. 26-32

## Синтез и исследование сцинтилляционных пигментов с перспективой использования в нейтронографии

И. Ю. Комендо<sup>1</sup>, О. В. Акимова<sup>1</sup>, А. Е. Амелина<sup>1</sup>, Е. В. Гордиенко<sup>1</sup>, Г. А. Досовицкий<sup>1</sup>,  
П. В. Карпюк<sup>1</sup>, М. В. Коржик<sup>2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, Москва, Россия

<sup>2</sup> НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Метод нейтронной радиографии позволяет получать контрастные изображения внутреннего строения объектов большого объема, сочетающих в себе органические и неорганические вещества. Этим методом проводят неразрушающий контроль качества авиационных двигателей и деталей, оболочек ТВЭЛов, интроскопию ДВС в процессе работы на тестовом стенде, также нейтронную радиографию используют в устройствах дистанционного досмотра для обнаружения горючих и взрывчатых веществ.

В системах получения изображений применяются экраны, покрытые слоем люминесцентного пигмента для фоторегистрации вспышки сцинтилляции, возникающей в области взаимодействия нейтрона с экраном. От характеристик покрытия экрана - толщины, равномерности, а также от эффективности поглощения нейтронов и их преобразования в свет, зависит качество изображения и, следовательно, возможности нейтронографической установки. Современные темпы развития техники приводят к постоянному повышению требований к конструкционным материалам, и, соответственно, к точности методов их анализа. Одним из возможных путей повышения качества и разрешения изображений в нейтронной радиографии является использование новых люминесцентных (сцинтилляционных) пигментов с большим световыходом и меньшим послесвечением по сравнению с применяющимися сейчас.

В коммерческих сцинтилляторных экранах для нейтронной радиографии применяются <sup>6</sup>Li, и Gd-содержащие сцинтилляционные пигменты: <sup>6</sup>LiF/ZnS, Gd<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S (GOS), GdI<sub>3</sub>:CsI, обладающие световыходом до 50 000 фотонов на МэВ поглощенной энергии гамма-излучения. В НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА были синтезированы сцинтилляционные материалы в стеклообразном и кристаллическом виде на основе боратов и силикатов лития, а также на основе порошков смешанных оксидов со структурой граната, активированные ионами РЗЭ. Световыход которых составляет до 60 000 фотонов/МэВ при активации церием и более 80 000 фотонов/МэВ при активации ионами тербия [1-2]. Также эти материалы обладают быстрой кинетикой высвечивания - основная компонента в пределах 60 нс. Сцинтилляционные свойства таких материалов сохраняются при диспергировании, что открывает возможности по их использованию в сцинтилляционных экранах нового поколения.

Настоящая работа посвящена получению и изучению свойств порошков составов (Gd,Y)<sub>3</sub>(Ga,Al)<sub>5</sub>O<sub>12</sub>:(Ce,Tb) методом соосаждения, а также литийсиликатных стёкол, легированных ионами Ce<sup>3+</sup> и Tb<sup>3+</sup>. Из этих материалов были 125 приготовлены устойчивые водно-полиакрилатные суспензии с наполнением ~30 % об. которые наносили на дюралевую подложку слоем от 80 до 500 мкм. Полученные образцы сцинтилляционных экранов тестировали на различных источниках нейтронов.

1. Tratsiak Y., Fedorov A., Dosovitsky G., Akimova O., Gordienko E., Korjik M., Mechinsky V., Trusova E. Scintillation efficiency of binary Li<sub>2</sub>O-2SiO<sub>2</sub> glass doped with Ce<sup>3+</sup> and Tb<sup>3+</sup> ions // Journal of Alloys and Compounds. 2018. Vol. 735. P. 2219;

2. Dosovitskiy G., Karpyuk P., Gordienko E., Kuznetsova D., Vashchenkova E., Volkov P., Retivov V., Dormenev V., Brinkmann K-T., Zaunick H-G., Mechinsky V., Fedorov A., Slusar I., Dosovitskiy A., Korzhik M. Neutron detection by Gd-loaded garnet ceramic scintillators, Radiation measurements, Vol. 126. 2019. P. 106-133

## Определение оптимальных параметров закалки новой аустенитной стали для внутрикорпусной выгородки ВВЭР–ТОИ

*И. В. Теплухина, А. С. Цветков, А. В. Косильникова*

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

В настоящее время для изготовления выгородки и других элементов ВКУ в качестве конструкционного материала применяется аустенитная сталь марки 08X18H10T.

Многочисленные экспериментальные исследования показывают, что высокие дозы нейтронного облучения, характерные для эксплуатации ВКУ (для выгородки ВВЭР-ТОИ – 160 сна за 60 лет), приводят к деградации физикомеханических свойств стали 08X18H10T и радиационному распуханию [1-3]. Кроме того, элементы выгородки подвергаются неоднородному нейтронному облучению по высоте, что обусловлено конфигурацией активной зоны. Неоднородность нейтронной дозы, а также  $\gamma$ -разогрев внутренних слоев выгородки приводит к возникновению неоднородного распределения температуры и распухания по ее объему, что, в свою очередь, вызывает возникновение внутренних напряжений. Кроме того, радиационное распухание и радиационная ползучесть приводит к формоизменению элементов ВКУ, что также ограничивает ресурс ВКУ. В течение срока службы реактора замена выгородки не предусматривается.

В настоящее время специалистами НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» производится разработка новой стали для ВКУ [4], обладающей высокой стойкостью к радиационному распуханию. Одновременно проводятся исследования в целях обоснования основных технологических параметров изготовления заготовок колец выгородки, обеспечивающих требуемые механические свойства, высокое сопротивление МКК и регламентированный размер зерна. Термическая обработка является завершающей технологической операцией, при которой происходит окончательное формирование структуры и свойств металла. В качестве основной термической обработки заготовок ВКУ применяется нагрев до высокой температуры с последующим охлаждением в воде.

В настоящей работе приведены результаты исследований влияния температуры нагрева под закалку и продолжительности выдержки на размер аустенитного зерна, механические свойства и склонность к МКК новой стали для ВКУ.

Произведена сравнительная оценка влияния параметров нагрева под закалку (температура и выдержка) на комплекс механических свойств, склонность к МКК и склонность к росту зерна новой (10X16H25M2T) и используемой стали (08X18H10T).

Результатом исследования является определение оптимальных параметров термической обработки новой стали для ВКУ, обеспечивающих требуемый уровень механических свойств при отсутствии склонности к МКК и размером зерна не крупнее G3 по ГОСТ 5639.

1. Г.П. Карзов, Б.З. Марголин. Основные механизмы радиационного повреждения материалов ВКУ и материаловедческие проблемы их длительной эксплуатации // РЭА. – 2015, № 2. – С. 8-15.

2. В.А. Пиминов, В.В. Евдокименко. Оценка прочности и ресурса ВКУ действующих и сооружаемых реакторов типа ВВЭР: реалистичный и консервативный прогнозы // РЭА. – 2015, №2. – С. 16-19.

3. А.А. Сорокин, Б.З. Марголин, И.П. Курсевич, А.И. Минкин, В.С. Неустроев, С.В. Белозеров. Влияние нейтронного облучения на механические свойства материалов внутрикорпусных устройств реакторов типа ВВЭР // Вопросы материаловедения. – 2011, № 2 (66). – С. 131-152.

4. И.П. Курсевич, Г.П. Карзов, Б.З. Марголин, А.А. Сорокин, И.В. Теплухина. Принципы легирования новой радиационно-стойкой аустенитной стали для ВКУ ВВЭР-1200, обеспечивающей их безопасную эксплуатацию не менее 60 лет // Вопросы материаловедения. – 2012, № 3 (71). – С. 140-15

## Полимеры для селективного газоразделения: соотношения «структура – свойства»

*М. Е. Пестрякова<sup>1</sup>, М. В. Бермешев<sup>2</sup>, Н. П. Евлампиева<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН, Москва, Россия

Мембранообразующие полимеры имеют большое значение для современной промышленности, ресурсосберегающих и «зеленых» технологий. Однако лишь немногие высокомолекулярные соединения нашли практическое применение для эффективного разделения газовых смесей. В первую очередь к ним относятся стеклообразные кремний- или германийсодержащие полиацетилены, для тонких пленок которых характерен большой свободный объём [1]. Поиск относительно недорогих полимеров, пригодных для селективного мембранного газоразделения не утратил своей значимости в 21 веке. В последние годы были синтезированы новые замещенные полинорборнены, обладающие высокими коэффициентами газопроницаемости и селективности в пленках. Эти полимеры могут быть получены аддитивным или метатезисным синтезом с применением разных типов катализаторов и промышленно доступных мономеров [2, 3].

Соотношения «структура-свойства» имеют важное значение для функциональных полимеров, и, как правило, такие соотношения всегда изучаются, если изменение в химической структуре или степени полимеризации влечет за собой изменение их физических свойств. Исследования последних лет выявили зависимость газопроницаемости тонких полимерных пленок от равновесной жесткости макромолекул, микроструктурной неоднородности и дипольной геометрии их цепей, тогда как газоселективность тех же пленок в большей степени зависит от химического строения полимера.

Изучение молекулярных свойств замещенных полинорборненов в растворах [4, 5] и сравнительное исследование их газотранспортных свойств в пленках [2, 3] позволило выявить влияние химической структуры на равновесную и кинетическую жесткость цепи полимеров, а также определить, как условия синтеза и строение мономера могут способствовать целенаправленному изменению газопроницаемости мембран на основе этих соединений.

1. Yampolskii Yu., Pinnau I., Freeman B.D. *Materials Science of Membranes for Gas and Vapor Separation*. Chichester: Wiley, 2006 – 466p.

2. Bermeshev M.V., Syromolotov A.V. et al. *Macromolecules*, 2013, 46, 8973.

3. Bermeshev M.V., Bulgakov B.A. et al. *Macromolecules*, 2014, 47, 5470.

4. Yevlampieva N.P., Bermeshev M.V. et al. *Polym. Sci.A*, 2017, 59, 473.

5. Yevlampieva N.P., Bermeshev M.V. et al. *J. Polym. Res.*, 2018, 25, 162.

## Направленный синтез люминесцентных материалов с задаваемой наноструктурой для твердотельных радиoluminesцентных источников света (ТРИС)

Е. В. Зеленина<sup>1,2</sup>, Е. А. Печерцева<sup>1,2</sup>, М. А. Швиндин<sup>1</sup>, К. А. Огурцов<sup>1</sup>, В. В. Бахметьев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Радиевый институт им. В. Г. Хлопина, Санкт-Петербург, Россия

Твердотельные радиoluminesцентные источники света (ТРИС) могут в перспективе заменить газонаполненные, так как являются более безопасными и эффективными. В качестве источника возбуждения используется радиоизотоп тритий. Для обеспечения высокой яркости свечения ТРИС важно подобрать соответствующий люминофор. В наших предыдущих исследованиях [1] было показано, что максимальная яркость достигается при использовании цинксульфидных катодолуминофоров.

Проведенные ранее исследования [2] были направлены на создание и обоснование модели поверхности цинк-сульфидных люминофоров, отражающей взаимосвязь ее кислотно-основных свойств с химическим составом и наличием структурных дефектов. Показана возможность использования корреляции интенсивности свечения люминофоров с интегральной характеристикой поверхности, суммарным содержанием активных центров  $pK_a$ , для прогнозирования характеристик электролюминесцентных устройств. В ходе исследования люминофоров методами малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) и рентгеновских лучей (МУРР), используемых для изучения структуры разупорядоченных сред, анализ наклона кривых МУРН и МУРР показал, что в цинк-сульфидных электролюминофорах (ЭЛФ) образование включений фазы сульфида меди происходит по границам «зерно-пора».

Отличие ЭЛФ от катодолуминофоров (КЛФ) в том, что последние представляют собой однофазный твердый раствор, а возбуждение происходит только за счет рекомбинации на центрах люминесценции и количество вводимого активатора в них на порядок ниже. Природа центров люминесценции, представленных в виде тех или иных структурных дефектов, а также их распределение в структуре люминофора, играют важную роль в обеспечении яркости свечения. Однако, исследование влияния структурных особенностей катодолуминофоров и изучение влияния условий их синтеза и модифицирования на эффективность люминесценции при возбуждении ионизирующим излучением не было осуществлено до сих пор. Поэтому дальнейшие исследования будут направлены на изучение изменений мезоструктуры КЛФ в зависимости от процентного содержания активатора, а также в зависимости от способа модифицирования. Стоит отметить, что в работе [1] показано положительное влияние электронного модифицирования на 130 яркостные и спектральные характеристики промышленных КЛФ при использовании их в ТРИС, что позволяет предположить определенное влияние и на их мезоструктуру. Помимо этого необходимо провести исследование влияния особенностей строения поверхности и микроструктуры зерен люминофоров на их рабочие свойства при возбуждении ионизирующим излучением. Также важной практической задачей стоит проверка модели кислотно-основных центров для катодолуминофоров с малым содержанием активатора, при учете их однофазной структуры и при более тонком регулировании количества активатора в образцах.

1. Зеленина Е.В., Сычев М.М., Костылев А.И., Огурцов К.А. Перспективы создания твердотельных радиoluminesцентных источников света на основе трития // Радиохимия. 2019. Т. 61, № 1. С. 51-55.

2. Бахметьев В.В., Сычев М.М., Корсаков В.Г. Модель активных кислотно-основных центров на поверхности цинк-сульфидных электролюминофоров // Журнал прикладной химии. 2010. Т. 83, № 11. С. 1770-1777

## **Повышение служебных характеристик реакторных установок атомных ледоколов**

*Р. И. Самойленко, М. Н. Тимофеев*

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

Доклад касается вопроса повышения прочностных свойств металла «силовых» малоуглеродистых наплавов до уровня требуемых значений и стойкости против хрупких разрушений металла «силовых малоуглеродистых наплавов».

В работе приведены результаты исследования механических свойств металла шва в исходном после сварки состоянии и после высокого отпуска при сочетании сварочной проволоки Св-06АА со сварочным флюсом АН-42М, а также сварочного флюса 48АФ-71 в сочетаниях со сварочной проволокой Св-06АА, Св-10ГА, Св-08ГС, Св-08Г2С, Св-10ГН и Св-08ГСМТ.

При анализе полученных результатов, сделан вывод, что взамен сварочной проволоки Св-06АА в сочетании с флюсом АН-42М применительно к выполнению «силовых» наплавов и монтажных сварных швов транспортных АЭУ рекомендуется проволока Св-08ГС в сочетании с флюсом 48АФ-71.

1. Карзов Г. П., Николаев В. А., Юрченко Е. В. и др. Анализ охрупчивания материалов корпусов реакторов ВВЭР-1000 в процессе эксплуатации // Там же. – 2009 - №4(60). С. 108- 123.

2. Тимофеев М.Н. «Создание сварочных материалов, обеспечивающих повышение служебных характеристик металла сварных швов корпусов атомных и нефтехимических реакторов из хромомолибденованадиевых сталей»

3. Волобуев Ю. С., Старченко Е. Г. Оптимизация состава и технологии изготовления флюса для сварки оборудования ответственного назначения как фактор, оказывающий решающее влияние на механические характеристики металла сварного шва // Тяжелое машиностроение. 2012. №7. С. 17—21.

4. Рьжков А.В., генеральный директор, главный конструктор ПАО ЦКБ «Айсберг» «Ледокольный флот как основа активного освоения арктического региона» статья к международной конференции «Материалы и технологии для Арктики»

5. К. т. н. М. Н. Тимофеев, д. т. н. Г. П. Карзов, к. т. н. С. Н. Галяткин, к. т. н. Э. И. Михалева “Технология сварки теплоустойчивых сталей углеродистыми сварочными материалами в условиях отсутствия термической обработки и опыт применения сварочных материалов”

6. Молчанова Л. Г., Погорельская М. З. Влияние легирующих элементов на свойства наплавленного металла и металла шва теплоустойчивых сталей // Сварка. 1960. №3, С. 27—38.

7. Теория свариваемости сталей и сплавов / Э. Л. Макаров, Б. Ф. Якушин; под ред. Э. Л. Макарова. – М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2014. – 487 с.

## Получение композиционных порошковых материалов системы «Al-УНВ» с помощью метода газофазного синтеза

*А. Н. Скворцова<sup>1</sup>, О. В. Толочко<sup>2</sup>, Т. С. Кольцова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> СПбПУ Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

Создание лёгких материалов с улучшенными антифрикционными свойствами является объектом изучения большого числа исследователей. В связи с этим исследования в области создания материалов из металлов, упрочнённых углеродными наноструктурами, последнее десятилетие активно развиваются, так как они обладают уникальной прочностью, износостойкостью и теплопроводностью.

Цель работы – получение композиционных материалов системы «алюминий – углеродное волокно» с повышенными механическими характеристиками. Объектом исследования являются гибридные материалы системы «алюминий – углеродные нановолокна», полученные газофазным синтезом в реакторе кипящего слоя путем осаждения УНВ непосредственно на поверхность алюминиевого порошка [1].

Путем изменения концентрации катализатора Ni были получены композиционные материалы, содержащие от 0,63 до 2,2 мас. % углерода. Полученные порошки были изучены методом сканирующей электронной микроскопии. Углеродный продукт имеет трубчатую структуру и практически полностью покрывает частицы матрицы алюминия. Диаметр углеродных волокон составляет 50-100 нм в диаметре и более 1 мкм в длину.

Композиционные порошковые материалы содержащие 1 и 2 мас.% углеродных нановолокон были использованы для создания покрытий. Для нанесения покрытий использовался метод холодного газодинамического напыления (ХГДН) [2]. Метод ХГДН основан на эффекте образования прочного металлического слоя при набегании двухфазного (твёрдое тело – газ) сверхзвукового потока на поверхность. Температура нагрева воздуха при ХГДН составляла 400-500 °С при скорости воздушного потока от 600 м/с до 650 м/с соответственно [3].

Разработанные физические модели и технологические подходы введения углеродных нановолокон перспективны для эффективного использования в тяжело нагруженных узлах трения судового оборудования и арматуры, элементов корпусных конструкций современного автомобилестроения, элементов систем управления, подвергающихся интенсивным механическим воздействиям, агрессивным химическим реагентам и биоповреждениям.

1. А.Н.Скворцова, К.А.Лычева, А.А. Возняковский, Т.С.Кольцова // Композиционные материалы на основе алюминия, упрочненные углеродными нановолокнами, Научнотехнические ведомости СПбГПУ 3(226)/2015, г.С-Пб, Издательство Политехнического университета, С. 78-84.

2. Геращенко Д.А., Орыщенко А.С. // Алюмоматричные функциональные покрытия с высокой микротвёрдостью, полученные из композиционных порошков системы Al – Sn + Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> методом холодного газодинамического напыления, Вопросы материаловедения. 2015. № 3 (83). С. 100-107.

3. Бреки А.Д., Т.С. Кольцова, А.Н. Скворцова, О.В. Толочко, С.Е. Александров, А.А. Лисенков, Д.А. Провоторов, Н.Н. Сергеев, Д.В. Малий, А.Н. Агеев, А.Е. Гвоздев // Антифрикционные свойства композиционных материалов на основе алюминия, упрочненных углеродными нановолокнами, при трении по стали 12Х, Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2016. № 4 (21). С. 11-23.

## Анализ структуры сварного соединения центробежнолитых труб из жаропрочного сплава 45X26H33C2B2

*М. А. Фролов, Е. В. Святыева, М. Д. Фукс, С. Ю. Кондратьев*

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

В настоящее время в качестве штатных конструкционных материалов для змеевиковых систем высокотемпературных установок нефтехимических и металлургических производств применяют жаропрочный сплав 45X26H33C2B2 [1, 2]. Из этого материала изготавливают элементы конструкций змеевиковых систем, которые соединяются сваркой. К сварному соединению предъявляются особые требования, учитывая неоднородность структуры, возникающую при технологическом процессе сварки и условия эксплуатации.

Следствием жестких условий эксплуатации является неизбежная нестабильность структуры и механических свойств как основного металла, так и металла шва. Так, в змеевиковых системах установок пиролиза отношение рабочей температуры к температуре солидус применяемого сплава достигает  $T_{\text{раб}}/T_{\text{сол}} = 0,85$  (с учетом перегревов до температур 1150-1200°C) [3]. В связи с этим для оценки работоспособности жаропрочного сплава как конструкционного материала и его сварного соединения необходимо изучить природу фаз, присутствующих в структуре, и характер их трансформации при эксплуатации [4]. Наиболее важной характеристикой является структурная стабильность основного металла, зоны термического влияния и металла шва. Однако для жаропрочного сплава 45X26H33C2B2 таких данных в литературе практически нет.

В настоящей работе приведены результаты структурных исследований сварных соединений труб с толщиной стенки 9 и 14 мм из сплава 45X26H33C2B2.

Металлографический анализ сварного соединения центробежнолитых труб из жаропрочного сплава 45X26H33C2B2 показал, что микроструктура основного металла состоит из  $\gamma$ -твердого раствора и карбидов хрома и ниобия. В структуре труб обеих толщин твердый раствор имеет ярко выраженное ячеистое дендритное строение с тонкими межкристаллитными границами. Дефекты в околошовной зоне не выявлены. Характер структуры сплава в различных зонах сварного шва изменяется одинаково в обеих трубах. Металл шва имеет вытянутую, направленную структуру в сторону теплоотвода, осуществлявшегося в процессе ручной аргонодуговой сварки. Дисперсность структуры увеличивается в направлении: основной металл – зона термического влияния – металл шва. При этом степень дисперсности структуры в металле шва различная в разных валиках при двухпроходной сварке. Размер карбидных включений в зонах сварного соединения изменяется таким же образом.

Для более детального изучения структурной неоднородности сварного соединения центробежнолитых труб из жаропрочного сплава 45X26H33C2B2, необходимо провести исследования при помощи растровой электронной микроскопии, а также оценить кратковременные и длительные механические свойства.

1. А.С. Орыщенко, Жаростойкие жаропрочные сплавы [Текст] / А.С. Орыщенко — СПб.: Наука, 2011. — 191 с.

2. А.С. Орыщенко, Разработка жаростойких сплавов для элементов конструкции радиантной части змеевиков высокотемпературных установок нефтесинтеза [Текст] / А.С. Орыщенко // Вопросы материаловедения. — 2006. № 1 (45).— С. 147–159.

3. С.Б. Масленков, Е.А. Масленкова, Стали и сплавы для высоких температур: Справочник в двух книгах. Книга 1. М.: Металлургия, 1991. 384 с.

4. С.З. Бокштейн, С.Т. Кишкин, Р.Е. Шалин, Структурная стабильность конструкционных материалов // Сб. Авиационные материалы на рубеже XX – XXI веков. М.: Изд-во ВИАМ, 1994. С. 547-553.

**Комплексы эндометаллофуллера Fe@C<sub>60</sub> с биосовместимыми полимерами:  
гидродинамическое поведение в водной среде**

*Д. С. Черчукин<sup>1</sup>, М. А. Слюсаренко<sup>1</sup>, А. А. Борисенкова<sup>2</sup>, В. Т. Лебедев<sup>2</sup>, Н. П. Евлампиева<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>2</sup> *НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия*

Для современных медико-диагностических томографических методов контрастные вещества (или контрастные агенты) имеют большое практическое значение. Синтез и поиск новых агентов, которые могли бы улучшить разрешающую способность при томографических исследованиях, остаются актуальными задачами [1,2]. Одними из наиболее перспективных соединений для этих целей являются металлосодержащие производные каркасных углеродных наночастиц – эндометаллофуллерены. Высокая спиновая плотность таких частиц как контрастных агентов могла бы на порядки улучшить разрешающую способность современной диагностической техники [2]. Однако для практического применения сугубо гидрофобные фуллерены и эндометаллофуллерены непригодны. Поэтому было предложено модифицировать эти частицы путем образования комплексов с биосовместимыми полимерами, что является традиционным приемом создания водорастворимой формы гидрофобных соединений.

Данная работа продолжает исследование гидродинамического поведения комплексов Fe@C<sub>60</sub> с поливинилпирролидоном (ПВП) и декстрином (Д) в водных средах [3]. Содержание наночастиц в составе полимеров варьировалось в интервале 5-25 % вес. Целью работы было определение гидродинамических размеров и стабильности комплексов Fe@C<sub>60</sub>-Д и Fe@C<sub>60</sub>-ПВП в растворах при вариации условий: рН среды, ионной силы, температуры и молекулярной массы полимера-носителя. В качестве методов исследования применялись динамическое рассеяние света, вискозиметрия и спектрофотометрия. Статическое светорассеяние в растворах указанных объектов имеет особенности, которые были отмечены ранее при исследовании комплексов фуллера C<sub>60</sub> с ПВП [4].

*Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 18-29-19008  
«Металлоуглеродные наноструктурированные материалы для биомедицины»*

1. Rasovic I. Water-soluble fullerenes for medical applications // Materials science and technology. 2017. V. 33, № 7. P. 777–794.

2. Lebedev V.T. et al. Biocompatible water soluble endometallofullerenes // Nanosys-tems: physics, chemistry, mathematics. 2016. V.7, №1. P. 1–7.

3. Евлампиева Н. П., Лебедев В.Т., Сжогина А.А., Дубовский И. М., Слюсаренко М.А. Полимерные комплексы эндофуллера Fe@C<sub>60</sub> биомедицинского назначения. // Вестник СПбГУ. Физика и химия. 2018. Т 5, № 2. С. 86–96.

4. Yevlampieva N. P. et al. Specifics of light scattering in solutions of fullerene-containing polymers. // Polym, Sci. Series A. 2007. V.49, №6 P. 642–650.

## **Исследование анизотропии механических свойств металла сварного шва оборудования АУЭ из теплоустойчивых сталей**

***И. С. Григорьев, М. Н. Тимофеев***

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

Доклад посвящен темеподтверждения соответствия механических свойств металла шва и сварного соединения оборудования и трубопроводов АЭУ выполненных из теплоустойчивых сталей.

В работе приведены результаты механических свойств металла шва в зависимости от ориентации надреза образцов (параллельно и перпендикулярно от оси шва) на ударный изгиб тип IX по ГОСТ 6996-66, а также влияние от вырезки образцов на растяжение (параллельно и перпендикулярно от оси шва) тип I по ГОСТ6996-66.

Сделан вывод, что влияние ориентации надреза образца Шарпи не оказывает какого-либо влияния на ударную вязкость и долю вязкой составляющей в изломе, а полученный разброс механических свойств образцов на растяжение при различной ориентировке оказался несущественным для выявления зависимости.

1. Орыщенко А.С., Карзов Г.П., Теплухина И.В. Стали для водо-водяных реакторов нового поколения с повышенной радиационной стойкостью // Вопросы материаловедения. -2011. - № 1 (65). – С. 28-40.

2. Карзов Г.П., Марголин Б.З., Теплухина И.В., Пиминов В.А. Повышение безопасности эксплуатации энергетических установок типа ВВЭР на основе совершенствования стали для корпусов реакторов// Вопросы материаловедения. – 2014. -№2 (78). – С. 184-198

3. Тимофеев М.Н., Галяткин С.Н., Шекин С.И., Михалева Э.И..Новый агломерированный флюс для автоматической сварки низколегированных теплоустойчивых сталей// Сварка и диагностика. – 2017. №2. С. 44-48

4. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии “Сварка и наплавка оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок” НП-104-18

5.Нормы расчета на прочность оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок ПНАЭ Г-7-002-86/ Энергоатомиздат, 1989.

6.Методика определения критической температуры хрупкости материалов корпусов реакторов по результатам испытаний образцов на ударный изгиб РД ЭО 0598-2004, Москва

7. Ашкенази Е.К., Ганов А.В. Анизотропия конструкционных материалов. Машиностроение, 1980.

8. Микляев П.Г., Фридман Я.Б. Анизотропия механических свойств металлов. Metallurgia, 1986

## Оксидные композитные катализаторы для снижения токсичности выхлопных газов

*Н. В. Яковлева, Б. В. Фармаковский*

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

Основным источником загрязнения атмосферы в крупных городах является автомобильный транспорт. Радикальным способом снижения токсичности выхлопных газов является применение каталитических нейтрализаторов, в которых происходит глубокое окисление оксида углерода CO до углекислого газа, восстановление оксидов азота NO<sub>x</sub> до азота и дожигание остатков несгоревшего топлива в виде предельных углеводородов C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>. В современных автомобильных нейтрализаторах широко используются TWC катализаторы (трехкомпонентные системы: металлическая подложка/пористый носитель/каталитический слой), в которых в качестве катализатора используют Pt и Pd, обеспечивающие окисление, и Rh, нейтрализующий оксиды азота [1, 2], а в качестве пористого носителя модификацию оксида алюминия γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Для получения такого катализатора используют химические методы, такие как пропитка и осаждение. Недостатками использования подобных катализаторов являются: высокая стоимость, возможность отслоения слоя катализатора от керамического носителя под действием колебаний температуры и ударных нагрузок, склонность к отравлению соединениями серы и свинца.

В настоящее время появились работы по исследованию возможности использования оксидов переходных металлов в качестве катализаторов очистки отработавших газов. На опытных образцах катализаторов на основе оксидов CuO, CoO, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, WO<sub>2</sub> достигнуты значения каталитической активности, приближающиеся к значениям, полученным на катализаторах на основе благородных металлов [3].

Задачей НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» являлась отработка технологии получения оксидных композитных катализаторов на металлической основе с высокой адгезионной прочностью и долговечностью при эксплуатации для снижения токсичности отходящих газов. В качестве материала активатора были выбраны оксиды CuO и Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, для напыления пористого слоя смесь алюминия, обеспечивающий высокую адгезионную прочность, и гидроксида алюминия, который в результате термической обработки существенно увеличивает удельную поверхность носителя. На металлическую подложку покрытие на основе гидроксида алюминия наносили с помощью метода микроплазменного напыления. Затем на полученный керамический носитель ионно-плазменным методом наносили слой металлического хрома и меди с последующим окислением на воздухе. При этом обеспечивалась высокая адгезия катализатора с керамикой, а также исключалась возможность отравления катализатора.

Разработанное каталитически активное покрытие показало высокие показатели каталитической активности, адгезионной прочности при высоком значении открытой пористости. Покрытие рекомендуется для применения в системах снижения токсичности отходящих газов, содержащих вредные органические вещества оксида углерода, CO и несгоревших предельных углеводородов.

1. Ribbens W. B. Understanding Automotive Electronics. 8th Edition, 2017. – 481 p.

2. Nihong An, Xiaoling Yuan, Bo Pan, Qinglin Li, Suying Li, Wenxiang Zhang. Design of a highly active Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst for low-temperature CO oxidation. // RSC Advances. – 2014. – № 4(72). – P. 38250–38257.

3. Ivanov K., Dimitrov D., Boyanov B. Deactivation of Cu–Cr/γ-alumina catalysts for combustion of exhaust gases // Engineering and technology international journal of chemical and molecular engineering. – 2011. – N 1(5). – P. 39–45.

## **Наноструктурированные материалы**

## Структурирование эндофуллеренолов никеля по данным МУРН

А. А. Борисенкова<sup>1,2</sup>, В. П. Седов<sup>1</sup>, М. С. Микулич<sup>1,2</sup>, Ж. Б. Лютова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия

Растущий интерес к созданию и стабилизации биосовместимых производных эндометаллофуллеренов обусловлен широкими возможностями их применения, например, для повышения контраста в магнитно-резонансной томографии, направленной доставки лекарственных препаратов. В дополнение к ранее полученным данным по структурированию эндофуллеренолов Fe@C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> [1,2], были изучены особенности самоорганизации эндофуллеренолов Ni@C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub>, полученных путем гидроксидирования экстракта эндометаллофуллеренов перекисью водорода [3].

Ставилась цель исследовать возникновение и эволюцию ближнего молекулярного порядка, характер молекулярных корреляций на различных пространственных уровнях при изменении внутренних условий и внешних параметров в системах.

В нейтронных экспериментах увеличение концентрации фуллеренола Ni@C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> на два порядка (C = 0.25-2.0 % масс.) не вызывает существенного изменения картины рассеяния. Оно усиливается примерно пропорционально концентрации — профили сечений демонстрируют подобие, что указывает на стабильность образующихся фуллеренольных агрегатов по размерам и геометрии при переходе от разбавленных систем к умеренно концентрированным растворам.

Найденные из аппроксимации данных фрактальные параметры D показывают, что в нейтральных растворах (pH=7) изменение температуры не оказывает существенного влияния на агрегацию. С повышением доли эндофуллеренола (0.25-2.0 % масс.) при 20 и 37°C показатель D = 3,2-3,4 и радиус корреляции кластеров R<sub>c</sub> = 15-17 практически не изменяются. В целом, структурирование Ni@C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> в растворах имеет сходство с упорядочением Fe@C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub>.

1. Сжогина А. А., Кульвеллис Ю. В., Лебедев В. Т., Седов В. П. Агрегация содержащих железо фуллеренолов в водных растворах // ЖПХ. 2015. Т. 88(12). С. 124—129.

2. Lebedev V. T., Szhogina A. A., Bairamukov V. Yu. Small angle neutron and X-ray studies of carbon structures with metal atoms // Journal of Physics: Conf. Series. 2017. No 848. 012005.

3. Седов В. П., Сжогина А. А., Суясова М. В., Лебедев В. Т. Способ получения эндофуллеренов 3d-металлов. Патент № 2664133 Заявка № 2017108883 от 16.03.2017.

## Профильный анализ дифрактограмм фуллеренов C<sub>60</sub> и C<sub>70</sub>

Е. К. Вдовина<sup>1,2</sup>, И. В. Голосовский<sup>1</sup>, В. П. Седов<sup>1</sup>, А. А. Борисенкова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия

Существует два подхода для описания кристаллической структуры фуллеренов. Во-первых, модель мероздрического двойникования в рамках пространственной группы Fm $\bar{3}$ 'm с четырьмя молекулами фуллерена в ячейке. В этой пространственной группе есть элемент симметрии, приводящий к двум возможным равновероятным ориентациям, отличающимся поворотом на 90° градусов вокруг направления [100], что соответствует двум равновероятным структурным двойникам. Во-вторых, возможен альтернативный, безмодельный, подход, предполагающий, что каждая молекула фуллерена является однородной сферической оболочкой атомов углерода.

В первом случае профильный анализ нейтронограмм (метод Ритвельда) был выполнен с помощью программы FULLPROF [1]. Следуя [2], были выбраны координаты три исходных атомов углерода, соответствующие координатам усеченного икосаэдра [3]. Расчет велся в рамках пространственной группы Fm $\bar{3}$ 'm.

На первом этапе анализ показал следующие параметры сходимости:  $\chi^2 = 19.4$  и взвешенный R-фактор RB = 18%. Была предпринята попытка улучшить сходимость, исходя из предположения, что какие-то углеродные фрагменты занимают пустые места между молекулами C<sub>60</sub>. Оказалось, что в такой модели действительно удается получить лучшую сходимость, а именно,  $\chi^2=7.7$  и RB = 6.1 %. Однако, оказалось, что хорошую аппроксимацию наблюдаемых интегральных интенсивностей отражений можно получить в модели однородной сферической оболочки, без какой-либо дополнительной ядерной плотности в междоузлиях.

Появление дополнительной ядерной плотности в междоузлиях можно рассматривать как отклонение от идеальной неупорядоченной модели с двумя равновероятными ориентациями молекулы фуллеренов. Следует заметить, что дополнительная заселенность, которая появляется в междоузлиях ГЦК-решетки в результате уточнения, может иметь и физическую природу, а именно, как следствие атомных колебаний с большой амплитудой.

Аналогично C<sub>60</sub>, начаты исследования кристаллической структуры фуллерена C<sub>70</sub>. Определены параметры элементарной ячейки. Исследования дополнительной атомной плотности в междоузлиях будут продолжены для C<sub>60</sub> и C<sub>70</sub>.

1. J. Rodriguez-Carvajal, Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction, Physica B: Phys. Condens. Matter, 192, 55–69, 1993, <http://www.ill.eu/sites/fullprof>.

2. W. David, R. Ibberson, J. Matthewman, K. Prassides, T. Dennis, J. Hare, R. Kroto, R. Talor, D. Walton, "Crystal structure and bonding of ordered C<sub>60</sub>", Nature. 353, 147-149, 1991.

3. P. Heiney "Structure, dynamics and ordering transition of solid C<sub>60</sub>", J. Phys. Chem. Solids. 53, 1333-1352, 1992.

4. J. Axe, P. Chow, S. Moss and P. Wochner, Physica, B220, 121-124, 1996.

## Новые полимерные наночастицы для потенциального применения в пищевых покрытиях

*А. П. Дысин, А. С. Критченков*

*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

Разработка новых безопасных интеллектуальных и активных покрытий является важной и актуальной задачей пищевой химии. Чтобы сделать пищевое покрытие умным и активным, используются различные добавки. Среди большого количества различных типов добавок наночастицы занимают особое место, поскольку они часто обладают улучшенными интеллектуальными или активными свойствами, а также могут выступать в качестве армирующих пленок и покрытий. Наночастицы с умными и активными свойствами вызывают все больший интерес к применению в пищевых пленках и покрытиях [CITATION Vas18 \l 1033 ][ CITATION Ram17 \l 1033 ]. В настоящем исследовании были впервые получены наночастицы, которые обладают одновременно умными (чувствительность к температуре) и активными (антибактериальность, светопоглощение и защита от окисления) свойствами.

Полученные наночастицы имеют в своей основе ядро, состоящее из смеси полиэтиленгликоля (ПЭГ) и метилцеллюлозы (МЦ) с антоцианидином и ацетатом натрия, и покрыты оболочкой на основе хитозана и галлотаннина. Они имеют гидродинамический диаметр  $\approx 450$  нм и заряжены положительно ( $\zeta$ -потенциал составляет +21 мВ и +23 мВ для наночастиц с соотношениями МЦ/ПЭГ 1:5 и 1:55 соответственно). Представленные наночастицы являются термохромными и при температуре около 20°C и 0°C соответственно меняют цвет с бесцветного на пурпурный.

Эти наночастицы обладают значительно большей антибактериальной активностью, чем исходный хитозан. Помимо этого, они эффективно поглощают ультрафиолетовое излучение, обладают высоким антиоксидантным эффектом (0,051 в тролокс-эквиваленте), нетоксичны и полностью состоят из одобренных для использования в пищевой промышленности компонентов.

*Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 19-016-00077 «Фундаментальные физико-химические исследования для создания съедобных «умных» активных покрытий для сыра с использованием наночастиц» (Руководитель - Критченков А.С.).*

1.Vasile C. Polymeric Nanocomposites and Nanocoatings for Food Packaging: A Review // Materials (Basel), No. 11, Oct 2018. pp. 18-34.

2.Ramos M., Jiménez A., Garrigós M.C. Active Nanocomposites in Food Contact Materials // Nanoscience in Food and Agriculture 4. Sustainable Agriculture Reviews, No. vol 24, 2017. pp. 1- 44

## **Физико-химические характеристики наноструктур и металлосодержащих композитов на основе природных полимеров**

**С. А. Ершова, Е. В. Лебедева, А. С. Губарев, А. А. Лезов, И. Ю. Перевязко, М. П. Петров, М. Е. Михайлова, А. А. Лезова, Н. Г. Микушева, А. С. Сеньчукова, Н. В. Цветков**

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

В настоящее время одним из перспективных методов получения новых полимерных материалов с заданными физическими свойствами является создание нанокомпозитов, в которых в качестве матриц используются полимерные материалы, а наполнителями выступают металлические наночастицы.

Подходящим кандидатом на роль полимерной матрицы являются частицы нанокристаллической целлюлозы (НКЦ), получаемой выделением сформированных в процессе биосинтеза кристаллитов целлюлозы ферментативным или кислотным гидролизом. Целлюлоза как один из самых распространенных природных полимеров нетоксична, а также биосовместима. Вместе с тем наночастицы металлов придают материалам на основе целлюлозы особые свойства.

В предваряющей нынешнее исследование работе [1] детально изучены физико-химические свойства водных дисперсий НКЦ с использованием комплексного подхода, включающего методы молекулярной гидродинамики, оптики и микроскопии. Сочетание данных скоростной седиментации и диффузии позволило получить сведения о молекулярно-массовом распределении частиц. Представленная работа посвящена исследованию образования комплексов частиц НКЦ с металлическими частицами  $Al_2O_3$  в водной дисперсии НКЦ. На основании результатов измерения двойного лучепреломления в потоке произведена оценка размеров и формы частиц НКЦ, а также выполнено сравнение гидродинамических размеров и оптического поведения гидрозоля гибридных частиц НКЦ-  $Al_2O_3$  по сравнению с гидрозолем НКЦ. Полученный комплекс сведений о гидродинамических и оптических свойствах частиц позволяет судить о составе, неоднородности нанокомпозита и его устойчивости.

В другой работе [2], которую мы хотели бы упомянуть для иллюстрации применимости предложенного комплекса гидродинамических методов к магнитным частицам нанодиапазона, представлены характеристики композитов на основе сверхразветвленных пиридилфениленовых полимеров, перспективных для применения в качестве катализаторов в реакциях тонкого органического синтеза. Проведены исследования растворов соответствующих объектов в тетрагидрофуране методами молекулярной гидродинамики: вискозиметрии, денситометрии и скоростной седиментации. Определены гидродинамические характеристики, а также молекулярная масса серии 154 образцов в широком диапазоне размеров, установлено, что в образце композита присутствуют как одиночные наночастицы, так и их агрегаты.

*Работа поддержана грантами РФФ № 16-13-10148-П и РФФИ мол\_нр №16-33-50134.*

1. Tsvetkov N. V., Lebedeva E. V., Lezov A. A., Perevyazko I. Yu., Petrov M. P., Mikhailova M. E., Lezova A. A., Torlopov M. A., Krivoschapkin P. V. Hydrodynamic and optical characteristics of hydrosols of cellulose nanocrystals. // Colloid and Polymer Science. 2017. Vol. 295, N1. Pp.13-24

2. Цветков Н.В., Губарев А.С., Сеньчукова А.С., Серкова Е.С., Шифрина З.Б. Гидродинамические характеристики сверхразветвленных пиридилфениленовых полимеров и нанокомпозитов на их основе. // Современные инновации. 2016, № 12(14), сс-18-23.

## Исследование радиационной стойкости производных эндометаллофуллеренов

*М. В. Суясова, А. А. Борисенкова, В. А. Шилин, В. П. Седов, Д. Н. Орлова*

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

Исследована радиационная стойкость при облучении протонами фуллеренов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ , эндометаллофуллеренов  $Me@C_{2n}$  ( $n = 30-50$ ), гидроксипроизводных  $C_{60}(OH)_{30}$  и  $Me@C_{2n}(OH)_{30-40}$  ( $Me = Sm, Eu, Gd, Tb, Ho, Fe, Co$ ), а также комплексов с биосовместимыми полимерами поливинилпирролидоном, декстрином  $Fe@C_{60}(C_6H_9NO)_n$ ,  $Sm@C_{82}(C_6H_9NO)_n$ ,  $Gd@C_{82}(C_6H_9NO)_n$  и  $Fe@C_{60}(C_6H_{10}O_5)_n$ . Для указанных структур при облучении протонами энергией 100 МэВ и 1 ГэВ определен состав получаемых изотопных продуктов, проведена оценка радиационной стойкости фуллеренов, эндометаллофуллеренов и водорастворимых производных. Проведено сравнение результатов радиационной стойкости при облучении протонами и в реакторе потоками тепловых и быстрых нейтронов в диапазоне флюенсов  $10^{18}-10^{19}$  см<sup>-2</sup> (кадмиевое отношение  $\sim 10$ ) [1-3]. Показано, что эндофуллеренолы более стабильны по сравнению с исходными эндофуллеренами при протонном и нейтронном облучении. При нейтронном облучении наиболее устойчивыми оказались молекулы, содержащие Eu, Gd и Sm, которые имеют большие сечения поглощения медленных нейтронов. Обсуждается механизм воспроизводства вторичных эндофуллеренолов Eu, Sm, Gd, а также влияние других факторов на радиационную стойкость.

1. Lebedev V. T. et al. Investigation of radiation resistance of fullerenes under irradiation with fast neutrons //Physics of the Solid State. – 2014. – Т. 56. – №. 1. – С. 178-182.

2. Szhogina A. A. et al. Radiation resistance of endohedral metallofullerenols under neutron irradiation //Crystallography Reports. – 2016. – Т. 61. – №. 4. – С. 666-669.

3. Shilin V. A. et al. Fullerenes and fullerlenols survival under irradiation //Наносистемы: физика, химия, математика. – 2016. – Т. 7. – №. 1.

## Синтез и структурные исследования эндоэдральных металлофуллеренов железа и их прекурсоров

*Фокин Н.С.<sup>1,2</sup>, Борисенкова А.А.<sup>1,2</sup>, Седов В.П.<sup>2</sup>*

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

*2 Санкт-Петербургский государственный технологический институт(технический университет), кафедра радиационной технологии*

В настоящее время большой научный интерес уделяется особой аллотропной форме существования углерода —фуллерену, представляющему собой замкнутую, сферическую структуру, состоящую из шестидесяти иболее атомов углерода.

Вскоре после открытия фуллерена были получены первые эндоэдральные структуры редкоземельных элементов (La@C<sub>60</sub>) [1]. Для группы 3*d*-элементов, таких как Fe, Ni, Mn, обладающих магнитными свойствами, а также переменной валентностью, синтеза подобных структур не приводили к успеху [2].

В водорастворимых гидроксированных эндометаллофуллеренах железа Fe@C<sub>60</sub>(ОН)<sub>х</sub>атом металла, заключенный в углеродную оболочку, является химически инертным, сохраняя при этом свои магнитные свойства. Таким образом, водорастворимые производные эндометаллофуллеренов железа имеют большой потенциал биомедицинских применений в качестве контрастирующих агентов в магнитно-резонансной томографии, в системах адресной доставки лекарств, а также в терапии раковых заболеваний методом гипертермии [3].

В данной работе был проведен синтез эндометаллофуллеренов железа методом электродугового испарения композитных электродов, содержащих в качестве прекурсора пиролизат фталоцианина железа в смеси с графитом. Испарение проводилось в атмосфере гелия при давлении 380 мм. рт. ст. и токе дуги 160 А.

С помощью анализа полученных образцов фталоцианина железа, его пиролизата, экстракта эндометаллофуллеренов и эндометаллофуллеренолов железа методом EXAFS-спектроскопии былоопределено положение атомов железа в данных соединениях.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что полученные металлофуллерены имеют эндоэдральный характер, расчетные значения радиусов координационных сфер (R) и числа вырожденных путей (n) совпадает со значениями для пространственной группировки P<sub>2</sub>.

1. Heath J. R., O'Brien S. C., Zhang Q., Liu Y., Curl R. F., Tittel F. K., Smalley R. E. Lanthanum Complexes of Spheriodal Carbon Shells // J. Am. Chem. Soc. 1985. V. 107. P. 7779–7780.

2. Akiyama K., Sueki K., Kodama T. et al. // Chem. Phys. Lett. 2000. V. 317. P. 490–496.

3.S. Boncel, A.P. Herman, K.Z. Walczak. Magnetic carbon nanostructures in medicine. J. Mater. Chem., 2012, 22, p. 31-37

## **Квантовая физика и химия**

## Фундаментальные инициируемые супероснованиями MOH(MOBut)/DMSO реакции ацетилена с аминами и имидами: теория и эксперимент

Д. З. Абсалямов, Н. М. Витковская, В. Б. Орел

Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия

Проведено сравнительное квантовохимическое B2PLYP/6-311+G\*\*//B3LYP/6-31+G\* исследование недавно открытых реакций ацетилена с аминами и имидами [1–3].

Рассмотрены реакции этинилирования и С-винилирования E-N,1-дифенилэтанимина фенилацетиленом. Иницирующее действие суперосновной среды приводит к образованию карбаниона имида ( $\otimes G^\ddagger = 10,2$  ккал/моль,  $\otimes G = 0,0$  ккал/моль) и фенилэтинид-иона ( $\otimes G^\ddagger = 0,0$  ккал/моль,  $\otimes G = -2,1$  ккал/моль). Этинилирование имида фенилэтинид-ионом ( $\otimes G^\ddagger = 20,9$  ккал/моль) завершается протонированием (2,4-дифенилбут-3-ин-2-ил)фенилазида молекулой фенилацетилена. При этом образуются стабильный N-(2,4-дифенилбут-3-ин-2-ил)анилин ( $\otimes G = -7,5$  ккал/моль) и фенилэтинид-ион, который вновь запускает реакцию этинилирования имида. Карбанион имида С-винилируется фенилацетиленом с близким этинилированию барьером активации ( $\otimes \otimes G^\ddagger = 0,9$  ккал/моль) и приводит к более стабильному на  $\otimes \otimes G = -22,4$  ккал/моль продукту –  $\langle \otimes \rangle$ -ненасыщенному имину. Предпочтительность образования фенилэтинидиона относительно карбаниона имида и значительный активационный барьер ( $\otimes G^\ddagger = 27,3$  ккал/моль) разложения образующегося продукта этинилирования препятствуют образованию термодинамически наиболее устойчивого продукта реакции С-винилирования и обеспечивают легкое этинилирование иминов ацетиленами.

Образование 2,5-диметил-1-фенил-пиррола ( $\otimes G = -109,9$  ккал/моль) из анилина и ацетилена осуществляется через ряд последовательных стадий: под действием супероснования образуется анион анилина и присоединяется по C $\equiv$ C связи ацетилена ( $\otimes G^\ddagger = 23,6$  ккал/моль). Через ряд миграций протонов формируется N-фенилэтанимин, который взаимодействует с этинид-ионом по C=N связи ( $\otimes G^\ddagger = 16,3$  ккал/моль) с образованием N-(бут-3-ин-2-ил)анилина, и дальнейшим этинилированием по C $\equiv$ C связи этинид-ионом ( $\otimes G^\ddagger = 24,9$  ккал/моль). Внутримолекулярная циклизация N-(гекс-3-ен-5-ин-2-ил)фенилазида N-центрированным анионом по C $\equiv$ C связи осуществляется с низким барьером активации ( $\otimes G^\ddagger = 13,0$  ккал/моль). Дальнейшие миграции протонов, приводящие к продукту – 2,5-диметил-1-фенил-пирролу, осуществляются с барьерами, не превышающими  $\otimes G^\ddagger = 12,8$  ккал/моль. Но в суперосновной среде непосредственно из ацетилена возможно образование гекса-2,4-диена ( $\otimes G = -60,5$  ккал/моль). Присоединение аниона анилина по второму С-атому гекса-2,4-диена ( $\otimes G^\ddagger = 24,5$  ккал/моль) приводит через ряд миграций протонов к гекс-2-ен-5-ин-2-ил(фенил)азаниду, способному к 168 внутримолекулярной циклизации N-центрированным анионом по C $\equiv$ C связи ( $\otimes G^\ddagger = 23,8$  ккал/моль). Протонирование образованного карбаниона приводит к ожидаемому пирролу. Полученные активационные барьеры и тепловые эффекты исследуемых превращений соответствуют условиям экспериментов.

*Работа поддержана грантом РФФИ № 18-03-00573-а.*

1. Bidusenko I.A. [et al.]. Transition-Metal-Free Addition of Acetylenes to Ketimines: the First Base-Catalyzed Ethynylation of the C=N Bond // European Journal of Organic Chemistry. 2018. № 35 (2018). P. 4845–4849.

2. Trofimov B.A., Schmidt E.Y. Acetylenes in the Superbase-Promoted Assembly of Carbocycles and Heterocycles // Accounts of Chemical Research. 2018. № 5 (51). P. 1117–1130.

3. Zheng Q., Hua R. CuCl-catalyzed cycloaddition of 1,3-butadiynes with primary amines: an atom-economic process for synthesis of 1,2,5-trisubstituted pyrroles // Tetrahedron Letters. 2010. № 34 (51). P. 4512–4514.

## Квантово-химическое исследование механизма реакции Трофимова: от циклогексаноксима и ацетилену до 4,5,6,7-тетрагидроиндола

А. С. Бобков, Н. М. Витковская

Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия

Пиррол – структурный фрагмент множества биологически важных соединений, что объясняет все возрастающий интерес к химии пирролов. Особое место среди возможных путей синтеза пирролов занимает реакция Трофимова, позволившая в довольно мягких условиях в суперосновных средах получать различные пиррольные структуры из оксимов и ацетилену. Механизм реакции Трофимова экспериментально подтверждается выделением промежуточных продуктов [1], однако до сих пор не было проведено его цельное квантовохимическое исследование в рамках единого теоретического подхода, позволяющее объяснить некоторые экспериментальные закономерности.

В рамках подхода B2PLYP/6-311+G\*\*//B3LYP/6-31+G\* с использованием анионной модели и оптимизацией геометрии в IEFPCM исследован механизм образования 4,5,6,7-тетрагидро-1Н-индола из циклогексаноксима и ацетилену в суперосновной среде KOH/DMSO [2], оценены кинетические и термодинамические характеристики отдельных стадий реакции, включая альтернативные каналы образования интермедиатов.

Показано, что первая стадия реакции (О-винилирование оксима 1 ацетиленом) с активационным барьером  $\Delta G^\ddagger_1 = 25,0$  ккал/моль является лимитирующей для всего процесса. 1,3-прототропная перегруппировка ( $\Delta G^\ddagger_2 = 7,4$  ккал/моль) образующегося винилоксима 2 в винилоксиамин 3 термодинамически невыгодна, поэтому активационный барьер последующего [3.3]-сигматропного сдвига в винилоксиамине отсчитан от более устойчивого аниона винилоксима ( $\Delta G^\ddagger_3 = 16,6$  ккал/моль), а тепловой эффект стадии образования иминоальдегида 4 составляет  $\Delta H = -47,7$  ккал/моль. Конформационный переход циклогексанового фрагмента из типа «кресло» в «твист», необходимый для циклизации 4, происходит с активационным барьером  $\Delta G^\ddagger_4 = 6,2$  ккал/моль, а последующее замыкание в цикл с образованием 5-гидроксипирролина 5 осуществляется легко  $\Delta G^\ddagger_5 = 3,6$  ккал/моль. Меньшая устойчивость 3 по сравнению с 2 и высокая реакционная способность 4 объясняет отсутствие этих соединений среди зафиксированных интермедиатов реакции Трофимова. Рассмотрено 5 маршрутов перехода из 5 к 3Н-пирролу 6. Прямая дегидратация не реализуется из-за экстремально высокого активационного барьера  $\Delta G^\ddagger_6 = 46,6$  ккал/моль. Более вероятно Овинилирование 5 ( $\Delta G^\ddagger_7 = 24,4$  ккал/моль) с образованием 5-винилоксипирролина 7. Внутримолекулярное элиминирование из 7 молекулы ацетальдегида кинетически не выгодно ( $\Delta G^\ddagger_8 = 34,1$  ккал/моль). Кинетически предпочтительнее отрыв гидроксид-ионом протона из 4 положения 7 с одновременным элиминированием аниона винилового спирта ( $\Delta G^\ddagger_9 = 20,7$  ккал/моль), который в одну стадию приводит к 6. Наиболее выгодным является механизм, инициируемый присоединением гидроксид-иона к C=N связи 7 и включающий три стадии (присоединение гидроксид-иона к C=N с одновременным элиминированием аниона винилового спирта,  $\Delta G^\ddagger_{10} = 16,7$  ккал/моль; отрыв протона гидроксид-ионом из 4 положения,  $\Delta G^\ddagger_{11} = 12,6$  ккал/моль; отщепление гидроксигруппы из 2 положения,  $\Delta G^\ddagger_{12} = 8,1$  ккал/моль). На второй стадии возможен отрыв протона не гидроксид-ионом, а анионом винилового спирта,  $\Delta G^\ddagger_{11\text{vin}} = 25,5$  ккал/моль. Перегруппировка из 6 в 1Н-пиррол 8 с участием гидроксид-иона происходит без активационного барьера.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ № 4.1671.2017/4.6 и поддержана грантом РФФИ № 18-03-00573-а*

1. Химия пиррола. Новые страницы / Б.А. Трофимов, А.И. Михалева, Е.Ю. Шмидт, Л.Н. Собенина. – Новосибирск: Наука, 2012. – 383 с.

2. Cycloalka[b]pyrroles from ketoximes and acetylene: Synthesis and kinetic investigation / A.M. Vasil'tsov, E.A. Polubentsev, A.I. Mikhaleva, B.A. Trofimov // Bull. Acad. Sci. USSR Div. Chem. Sci. – 1990. – V. 39. P. 773–776

## g-фактор многозарядных бороподобных ионов

Д. В. Зиненко

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

За последние два десятилетия был достигнут значительный прогресс в исследованиях g-фактора в многозарядных ионах [1,2]. Современные эксперименты достигли точности  $10^{-9}$ – $10^{-11}$  для водородо-, литие- и бороподобных ионов [3–6]. В частности, эти исследования привели к наиболее точному на сегодня определению массы электрона [7]. Кроме того, было предложено определять постоянную тонкой структуры  $\alpha$  с помощью измерения g-факторов легких [8] и тяжелых [9] ионов с несколькими электронами. g-фактор основного состояния бороподобного аргона был недавно измерен с точностью до  $10^{-9}$  в рамках проекта ALPHATRAP в Институте имени Макса Планка [6]. Полученное экспериментальное значение полностью согласуется с теоретическим [6]. Проект ARTEMIS в GSI реализует метод лазерномикроволновой двухрезонансной спектроскопии зеемановского расщепления как в основном, так и в первом возбужденном состояниях бороподобных ионов со средними значениями  $Z$  [10,11]. В данной работе представлены теоретические расчеты g-фактора основного и первого возбужденного состояний бороподобных ионов в диапазоне  $Z = 10$  — 92. Поправка на межэлектронное взаимодействие первого порядка оцениваются в рамках строгого КЭД-подхода в различных эффективных экранирующих потенциалах. Поправка на межэлектронное взаимодействие второго порядка рассматривается в приближении Брейта. КЭД поправки, а также поправки на отдачу и конечный размер ядра также принимаются во внимание. Результаты для g-фактора основного и первого возбужденного состояний бороподобных ионов в диапазоне  $Z = 10$  — 20 представлены в наших недавних работах [12,13].

1. S. Sturm et al., *Atoms* 5, 4 (2017).
2. V. M. Shabaev et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data* 44, 031205 (2015).
3. S. Sturm et al., *Phys. Rev. Lett.* 107, 023002 (2011).
4. A. Wagner et al., *Phys. Rev. Lett.* 110, 033003 (2013).
5. F. Köhler et al., *Nat. Commun.* 7, 10246 (2016).
6. I. Arapoglou et al., *Phys. Rev. Lett.* 122, 253001 (2019).
7. S. Sturm et al., *Nature* 506, 467 (2014).
8. V. A. Yerokhin et al., *Phys. Rev. Lett.* 116, 100801(2016).
9. V. M. Shabaev et al., *Phys. Rev. Lett.* 96, 253002(2006).
10. D. von Lindenfels et al., *Phys. Rev. A* 87, 023412 (2013).
11. M. Vogel et al., *Ann. Phys. (Berlin)* 531, 1800211 (2019).
12. V. A. Agababaev et al., *J. Phys. Conf. Ser.* 1138, 012003 (2018).
13. V. A. Agababaev et al., *X-Ray Spectrometry* (2019).

## Прецизионные расчеты спектров атомов скандия, титана и йода

*Р. Т. Иманбаева<sup>1,2</sup>, М. Г. Козлов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Метод, основанный на комбинации наложения конфигурации (CI) и многочастичной теории возмущений (МВРТ), имеет высокую точность при вычислении спектров одно- и двухвалентных атомов [1]. Однако, для большинства атомов с большим числом валентных электронов она ниже в результате недостаточного насыщения конфигурационного пространства.

В данной работе описано применение метода CI+ МВРТ для вычисления энергетических уровней нейтральных Скандия, Титана и Йода, которые представляют собой атомы с тремя, четырьмя и семью валентными электронами соответственно. Такие системы в настоящее время рассматриваются как потенциальные кандидаты для новых стандартов частоты. Описанный метод позволяет повысить точность теории для подобных систем. Это важно, так как экспериментальные спектры часто неизвестны. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. Выполнено сравнение результатов при применении различных методов CI, CI+МВРТ, и CI+МВРТ с учетом трехэлектронного взаимодействия [2].

1. E. A. Konovalova, M. G. Kozlov, Phys. Rev. A 92, 042508 (2015)
2. M. Kozlov, M. Safronova, S. Porsev, I. Tupitsyn, Phys.Rev. A 94,032512 (2016)

## Анализ сверхтонкой структуры спектров изотопов франция

Е. А. Коновалова<sup>1</sup>, Ю. А. Демидов<sup>1,2</sup>, М. Г. Козлов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Константы сверхтонкой структуры и изотопические сдвиги спектральных линий чувствительны к изменениям в распределении заряда и намагниченности по ядру. Анализ изменений этих атомных свойств в изотопических рядах позволяет изучать различные ядерные свойства. В приближении точечного ядра отношение констант сверхтонкой структуры для двух изотопов равно отношению их  $g$ -факторов. При учете конечных размеров ядра необходимо учитывать распределение намагниченности по ядру (эффект Бора-Вайскопфа) и зависимость электронной волновой функции от радиуса ядра (эффект Брейта-Розенталя). Вместе эти поправки известны как сверхтонкая магнитная аномалия (СМА).

Прецизионные измерения отношения сверхтонких констант  $A(7s)/A(7p_{1/2})$  для различных изотопов франция указывают на значительную величину СМА [1, 2]. Поскольку все изотопы франция короткоживущие, их ядерные магнитные моменты могут быть извлечены только из анализа сверхтонкой структуры, при этом необходимо учитывать СМА. В данной работе константы сверхтонкой структуры вычислены теоретически в рамках различных методов моделирования электронной структуры. В качестве начального приближения использован метод Дирака-Хартри-Фока, в рамках которого валентный электрон находится в поле замороженного атомного остова. Валентно-остовные корреляции учтены в рамках методов многочастичной теории возмущений второго порядка с частичным учётом вклада высших порядков. Учитывались поправки Брейта, квантовой электродинамики, структурного излучения и спиновой поляризации остова на величину констант сверхтонкой структуры. В результате были получены скорректированные значения ядерных магнитных моментов изотопов франция и систематизированы имеющиеся экспериментальные данные [3]. Для некоторых изотопов поправка на СМА к  $g$ -фактору составляет 2%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-02-00216 А).*

1. J. Grossman, et al., Phys. Rev. Lett. 83, 935 (1999).
2. J. Zhang, et al., Phys. Rev. Lett. 115, 042501 (2015).
3. E.A. Konovalova, et al., Atoms 6, 39 (2018).

## Расчет эффектов несохранения четности в катионе $\text{HfF}^+$

*И. П. Курчавов<sup>1, 2</sup>, А. Н. Петров<sup>1, 2</sup>*

*1 НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

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

Для поиска новой физики за пределами Стандартной модели или её подтверждения проводят эксперименты с захваченными ионами [1], к которым относится катион  $\text{HfF}^+$ , по обнаружению перманентного электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона. Планируются эксперименты по измерению других Т,Р-нечетных свойств, таких как магнитный квадрупольный момент (МКМ) ядер гафния  $^{177}\text{Hf}$  и  $^{179}\text{Hf}$  [2].

Целью работы является исследование чувствительности уровней сверхтонкой структуры  $^{177}\text{HfF}^+$  и  $^{179}\text{HfF}^+$  к Т,Р-нечетным свойствам во внешних постоянных и переменных электрических и магнитных полях. Для вычисления использовались методы и программы для расчета спектра молекулы при наличии взаимодействий с внешними переменными полями, ЭДМ электрона и МКМ ядра [3].

В результате исследования были получены зависимости для g-факторов уровней энергии катиона как функций электрического поля при учёте сверхтонкого взаимодействия с ядрами Hf и F. Рассчитаны кривые для зависимости чувствительности к ЭДМ электрона и МКМ ядер от вращающихся электрических и магнитных полей для разных проекций полного момента молекулы. Расчеты проведены с учётом реальных возможных значений полей в экспериментах.

В работе определены уровни сверхтонкой структуры  $^{177}\text{HfF}^+$  и  $^{179}\text{HfF}^+$  и напряженности внешних полей оптимальные для проведения экспериментов по поиску эффектов нарушающих Р четность и Т инвариантность. Выполненные расчеты учитывают неадиабатические взаимодействия между различными электронными состояниями и взаимодействия между различными вращательными состояниями за счет сверхтонкого взаимодействия и взаимодействия с внешними полями. Результаты сравниваются с упрощенной моделью, для которой возможны аналитические выражения, где данные взаимодействия не учитываются. Выполненные расчеты необходимы для планирования эксперимента на катионах  $^{177}\text{HfF}^+$  и  $^{179}\text{HfF}^+$  и интерпретации последующих экспериментальных данных.

1. H. Loh et al., Science 342 (6163), 1220-1222.
2. A. N. Petrov, L. V. Skripnikov, and A. V. Titov, Phys. Rev. A 98, 042502 (2018)
3. A. N. Petrov, Phys. Rev. A 97, 052504 (2018)

## Кластерная модель ксенотима $YPO_4$

Ю. В. Ломачук, Д. А. Мальцев, Н. С. Мосягин, Л. В. Скрипников, А. В. Зайцевский, А. В. Титов

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Природные ортофосфаты иттрия и редких земель (минералы ксенотим  $YPO_4$  и монацит  $CePO_4$ ) отличаются высокой химической и радиационной стойкостью и рассматриваются в качестве природных аналогов матриц для иммобилизации актинидов. Упомянутые структуры являются основой широкого класса метамиктных соединений, в состав которых входят в примесных количествах радионуклиды U и Th [1].

Для квантово-механического расчета состояний указанных примесей в кристаллах необходимо построение кластерных моделей.

В настоящей работе на примере кристалла ксенотима  $YPO_4$  показана возможность построения такой модели при помощи разделения кластера на три области:

1. Основной кластер – электроны атомов, входящих в эту область включаются в расчет явным образом, кроме электронов на самых внутренних оболочках тяжелых атомов, которые моделируются введением релятивистских потенциалов остова для соответствующих атомов [2, 3];

2. Слой катионов  $Y^{3+}_{22}$  ближнего окружения – ионы, входящие в эту область, моделируются с использованием 0-электронных релятивистских потенциалов остова и дополнительных электростатических зарядов на ядрах атомов; параметры этих потенциалов вычисляются из результатов расчетов периодической структуры кристалла;

3. Слой анионов  $O^{2-}_{104}$  моделируется электростатическими зарядами на ядрах атомов.

Дополнительные заряды катионов и анионов рассматриваются как параметры потенциала встраивания в кристалл, конкретный вид потенциала определяется из условия минимума средней силы, действующей на атомы основного кластера. Для проверки построенной модели используется сопоставление с результатами расчетов для периодической структуры и экспериментальными данными. Значения средней силы действующей на атомы основного кластера менее чем  $10^{-4}$  ат. ед. при использовании положений ядер атомов, полученных из расчета периодической структуры кристалла, что соответствует смещениям атомов от равновесных положений в кластере порядка 0.001 Å.

Для построенной модели вычислены частоты собственных колебаний системы, проведено сопоставление с экспериментальными данными.

С использованием данной модели вычислены свойства ионов U, Th в ксенотиме. Показано, что ионные состояния  $X^{3+}$  энергетически более выгодно, чем  $X^{4+}$  ( $\Delta E \sim 5$  эВ), при этом энергетический выход реакции встраивания показывает, что встраивание  $X^{3+}$  невозможно.

*Расчеты проведены с использованием оборудования центра общего доступа ПИК НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ.*

1. Nakai I., Akimoto J., Imafuku M. et al. // Phys. and Chem. Of Minerals. 1987. V. 15. N. 2. P. 113–124.
2. Titov A.V., Mosyagin N.S. // Int. J. Quantum Chem. 1999. V. 71. N. 5. P. 359–401.
3. Mosyagin N.S., Zaitsevskii A.V., Skripnikov L.V., Titov A.V. // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. N. 4. P. 301-315.

## Сверхтонкая структура $\text{Th}^{2+}$

А. В. Майорова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Центр перспективных исследований, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В современном мире для навигационных, военных, финансовых, научных и прикладных целей используются высокоточные атомные часы. Кроме того, атомные часы могут служить эффективным инструментом для таких фундаментальных исследований, как поиск и измерение вариаций фундаментальных констант и изучение эффектов квантовых корреляций. Однако далеко не всякий атом (или молекула) могут стать основным элементом для атомных часов. Для работы высокоточных часов необходимо, чтобы энергетические уровни в системе, между которыми происходит переход, имели очень маленькие ширины. Кроме того, атомные часы должны быть как можно менее чувствительны к внешним полям. Последние пятьдесят лет секунда определяется в международной системе единиц СИ через переход между двумя уровнями сверхтонкой структуры основного состояния атома  $^{133}\text{Cs}$ . Точность цезиевого стандарта частоты составляет величину порядка  $(\Delta\nu/\nu)10^{-16}$ .

В 2003 году была предложена идея создания на ядерных переходах [1], ожидаемая точность таких часов оценивается как  $(\Delta\nu/\nu)10^{-19}$ . Преимущество ядерных часов перед атомными состоит в том, что переходы в ядрах в меньшей степени подвержены влиянию внешних полей. Однако для ядерных часов значительно серьезнее стоит проблема индуцирования переходов между состояниями. Для того, чтобы такие переходы стали возможны, потребовались бы стабильные лазеры с диапазоном энергий порядка МэВ, что технически недостижимо в обозримом будущем. Однако существуют две системы, потенциально подходящие на роль основания для ядерных часов. Это  $^{235}\text{U}$ , где расстояние между ядерными уровнями составляет величину до 1 кэВ, и  $^{229\text{m}}\text{Th}$ —единственное известное ядро, в котором существуют ядерные состояния, различающиеся на величину порядка нескольких эВ. Первые оценки расстояния между этими уровнями были сделаны еще в 1976 г. [2], когда было открыто, что в  $^{229\text{m}}\text{Th}$  существует низко лежащее состояние с энергией, не превышающей 100 эВ. По последним данным энергия первого возбужденного изомерного состояния  $^{229\text{m}}\text{Th}$  лежит в диапазоне от 6.3 эВ до 18.3 эВ [3], при этом ширина данного состояния оценивается как величина порядка нэВ. Однако для создания ядерных часов необходима более полная информация о системе, например, необходимо знать значение энергии ядерного изомера с высокой точностью, величины ядерных магнитного дипольного и электрического квадрупольного моментов.

Значения этих моментов могут быть получены из исследований сверхтонкой структуры атомов или ионов тория. Удобной системой является ион тория  $\text{Th}^{2+}$ , так как он обладает относительно простой электронной структурой и достаточным временем жизни изомерного ядерного состояния. Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию сверхтонкой структуры иона  $\text{Th}^{2+}$  в ядерном основном и изомерном состояниях.

*Данная работы выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (грант №. 3.1463.2017/4.6) и РФФИ (грант № 17- 02-00216).*

1. E. Peik and Chr. Tam, Europhysics Letters 61, 181 (2003).
2. L.A. Kroger and C.W. Reich, Nuclear Physics A 259, 29-60 (1976).
3. L. von der Wense et al. Nature 533, 47–51 (2016).

## Трехатомные молекулы с тяжелыми атомами для поиска Новой физики

Д. Е. Майсон<sup>1,2</sup>, Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Наиболее актуальным направлением теоретической физики является поиск теории фундаментальных физических взаимодействий. На данный момент предполагается, что такая теория должна представлять собой расширение Стандартной Модели. Сама Стандартная Модель успешно описывает множество наблюдаемых явлений, однако не в состоянии объяснить ряд эффектов, таких, как существование темной материи и энергии, а также предложить описание гравитации на языке квантовой теории. Поэтому на данный момент существуют многочисленные расширения Стандартной Модели, предлагающие решения данных проблем.

Каждая из получающихся при этом теорий допускает нарушение С,Р,Т-инвариантности – эффект, допускающий прямое экспериментальное детектирование. Степень нарушения инвариантностей относительно преобразований пространственной инверсии (Р), обращения времени (Т) или зарядового сопряжения (С) – это величина, которая может на порядки различаться для различных моделей взаимодействия. Таким образом, измеряя, к примеру, Р,Т-нечетные характеристики, мы можем накладывать сильные ограничения на предлагаемые теории, приближаясь к определению единственно верной.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию электронной структуры трехатомных молекул для постановки такого рода экспериментов. Дело в том, что искомые Р,Т-нечетные параметры (самым известным примером является электрический дипольный момент электрона) не допускают непосредственного измерения, их можно определить лишь имея результаты и эксперимента, и теоретического расчета. Недавнее предложение использовать в таких экспериментах трехатомные молекулы вместо двухатомных обещает привести к получению более актуальных результатов [1,2].

В настоящей работе проведены расчёты свойств электронной структуры молекул YbOH и TlCN. Для первой вычислена константа взаимодействия электронов с магнитным квадрупольным моментом ядра, для второй – константа взаимодействия электронов с шиффовским моментом. При вычислении характеристик электронной структуры использовались реализации метода связанных кластеров: многоссылочное приближение (MR-CC) и связанные кластеры в пространстве Фока (FS-CC).

*Построение матричных элементов для исследуемых операторов проведено при поддержке Гранта Президента РФ № МК-2230.2018.2. Решение корреляционной задачи для многоэлектронной системы проведено при поддержке Гранта РНФ №19-72-10019. Расчеты в данной работе были выполнены с использованием ресурсов центра коллективного пользования "Моделирование и прогнозирование свойств материалов» НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ.*

1. Kozyryev I., Hutzler N. R. Precision measurement of time-reversal symmetry violation with laser-cooled polyatomic molecules //Physical review letters. – 2017. – Т. 119. – №. 13. – С. 133002.

2. Isaev T. A., Berger R. Polyatomic candidates for cooling of molecules with lasers from simple theoretical concepts //Physical review letters. – 2016. – Т. 116. – №. 6. – С. 063006.

## Применение потенциала встраивания кластера в кристалл для исследования локальной электронной структуры в ферсмите

Д. А. Мальцев<sup>1</sup>, Ю. В. Ломачук<sup>1</sup>, Н. С. Мосягин<sup>1</sup>, В. М. Шахова<sup>1,2</sup>, Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>

А. В. Зайцевский<sup>1,3</sup>, А. В. Титов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Модель потенциала встраивания кластера в кристалл (ПВКК) предназначена для расчетов локальных свойств, процессов и точечных дефектов в кристаллических структурах в кластерном приближении, что позволяет использовать более точные квантово-химические подходы, недоступные для твердотельных расчетов, в том числе с использованием концепции «atoms in compounds» [1]. Это особенно актуально, если в исследуемом кристалле в качестве основных или примесных атомов присутствуют тяжелые d- и f элементы, имеющие сложную электронную структуру, и для которых методы, совместимые с твердотельными программами, в принципе недостаточны.

В настоящей работе разработанная модель ПВКК — СТЕР (Compoundtunable embedding potential), предварительный вариант которой был опубликован в [2], была применена для расчёта локальных электронных свойств атомов кальция и ниобия в ферсмите (ниобате кальция). Для обоих типов атомов были построены встроенные кластеры, с высокой точностью воспроизводящие как геометрическую структуру, так и распределение электронной плотности вблизи центрального атома. На атоме ниобия были рассчитаны химические сдвиги рентгеновских эмиссионных спектров (ХС РЭС).

В дальнейшем планируется применить потенциалы встраивания, построенные для идеального кристалла, для расчёта состояния примесных элементов, таких как уран, что представляет интерес в связи с возможностью применения тантало-ниобатов в качестве иммобилизационных матриц для хранения ядерных отходов.

1. A.V. Titov, Yu.V. Lomachuk, L.V. Skripnikov, Concept of effective states of atoms in compounds to describe properties determined by the densities of valence electrons in atomic cores, Phys. Rev. A, 90, 052522 (2014)

2. Yu.V. Lomachuk, D.A. Maltsev, Yu.A. Demidov, N.S. Mosyagin, L.A. Batalov, E. Fomin, R.V. Bogdanov, A.V. Zaitsevskii, A.V. Titov, Calculations of Chemical Shifts of X-ray Emission Spectra and Effective States of Nb Atom in the Niobates, Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 20, 2, 170-176 (2017)

## Вычисление констант сверхтонкого расщепления с учетом поправок на структуру ядра для различных электронных состояний изотопов таллия

С. Д. Просняк<sup>1,2</sup>, Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>, Д. Е. Майсон<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Современные методы спектроскопии позволяют с высокой точностью измерять константы сверхтонкого расщепления для различных электронных состояний атомов и молекул, что приводит к большому объёму данных для анализа и интерпретации. Для точного воспроизведения экспериментальных значений энергии сверхтонкого расщепления в тяжелых атомах с погрешностью порядка 1% необходим прецизионный расчёт электронной структуры. Кроме того, для достижения такой точности оказывается необходимым учесть поправки на структуру ядра. Эти поправки возникают из-за распределения заряда (эффект Брейта-Розенталя [1]) и намагниченности (эффект Бора-Вайскопфа [2]) по ядру.

В проведённой работе, посвящённой атому Tl [3], было продемонстрировано, что эти эффекты могут быть учтены с использованием гауссова базисного набора для расчетов электронной структуры. Кроме того, было проведено исследование магнитной аномалии сверхтонкой структуры – специальной комбинации констант сверхтонкого взаимодействия и g-факторов двух различных изотопов, достаточно чувствительной к различиям в распределении намагниченности. Как известно, отношение аномалий для двух различных электронных состояний является стабильным относительно выбора ядерной модели и ее параметров [4]. Этот факт был использован для предсказания магнитных моментов короткоживущих изотопов. Полученные значения хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. В докладе будут представлены результаты, полученные в работе [3] с использованием модели ядра как равномерно намагниченной сферы, а также последние результаты применения более сложных моделей ядра.

*Расчёты электронной структуры выполнены при поддержке гранта Президента РФ МК-2230.2018.2. Код по расчёту матричных элементов оператора, учитывающего конечное распределение намагниченности ядра в различных моделях развит и применён за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10019).*

1.M. Crawford, Phys. Rev. 76, 1310 (1949).

2.A. Bohr and V. Weisskopf, Physical Review 77, 94 (1950).

3.S.D. Prosnjak, D.E. Maison and L.V. Skripnikov, arXiv:1903.03093, (2019).

4.S. Schmidt, J. Billowes, M. Bissell, K. Blaum, R. G. Ruiz, H. Heylen, S. Malbrunot-Ettenauer, G. Neyens, W. Nörtershäuser, G. Plunien, et al., Phys. Lett. B 779, 324 (2018).

## Механизм генерации синглетного кислорода на поверхности возбужденного нанопористого кремния

Д. М. Самосват<sup>1,2</sup>, О. П. Чикалова-Лузина<sup>1</sup>, Г. Г. Зегря<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Недавние исследования показали перспективность нанопористого кремния (np-Si) для задач микро- и оптоэлектроники [1] а также для задач биологии и медицины [2,3]. Как было показано в ряде работ [2,4,5], на поверхности возбужденного нанопористого кремния возможна генерация синглетного кислорода. Это было показано как прямым измерением люминесценции [4], так и косвенно, на основе биологического действия синглетного кислорода [5]. Поэтому выяснение точного механизма этого процесса является важной задачей. В работах [4,5,6] было сделано предположение о роли обменного взаимодействия в данном процессе. В работе [6] предложен механизм генерации синглетного кислорода за счет одновременного туннелирования электрона и дырки с участием или без участия фононов. Данный механизм аналогичен по своей сути тандем механизму переноса энергии, рассмотренному в работе [7]. Тем не менее, данный механизм не рассматривается в данной работе, поскольку на наш взгляд он менее эффективен, чем обменное взаимодействие без переноса заряда. Кроме того, хотя возможно проявление дипольного механизма передачи энергии за счет нарушения спиновых правил отбора при спин-орбитальном взаимодействии в кремнии и кислороде, тем не менее этот эффект ничтожно мал в силу слабости спин-орбитального взаимодействия в кислороде.

Представлен теоретический анализ механизма генерации синглетного кислорода на поверхности фотовозбужденного нанопористого кремния. Показано, что в основе механизма генерации синглетного кислорода лежит безызлучательный перенос энергии от нанопористого кремния к молекуле кислорода по обменному механизму Декстера. Получено аналитическое выражение и дана численная оценка вероятности переноса энергии от нанопористого кремния к молекуле кислорода. Показано, что ее численное значение порядка  $10^3 - 10^4 \text{ с}^{-1}$  достаточно хорошо согласуется с экспериментом. Получены зависимости темпа генерации синглетного кислорода от толщины стенки пористого кремния и показано существование максимума при толщине стенки порядка 1.83 нм, что хорошо согласуется с типичными толщинами стенок для нанопористого кремния.

1. Porous silicon from formation to application, ed. by G. Korotcenkov. (London, CRC Press, 2016).
2. D. Kovalev, E. Gross, F. Koch et al. Phys. Rev. Lett., 89, 137401 (2002).
3. Photodynamic tumor therapy: 2nd and 3rd generation photosensitizers, ed. by J. G. Moser. (London, CRC Press, 1998).
4. М. Б. Гонгальский, Е. А. Константинова, Л. А. Осминкина, В. Ю. Тимошенко. ФТП, 4, 1 (2010).
5. В. Ю. Тимошенко, А. А. Кудрявцев, Л. А. Осминкина et al. Письма в ЖЭТФ. 83, 492, (2006).
6. D. Kovalev, M. Fujii. Adv. Mater. 17, 2531–2544 (2005).
7. K. V. Reich, B. I. Shklovskii. ACS NANO, 10, 10267 (2016).

## Изучение свойств ядер тяжелых элементов с использованием молекулярных систем

Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В работе [1] нами была разрешена проблема, связанная с расхождением между теоретическими предсказаниями специальной разницы сверхтонких расщеплений в многозарядных ионах [2] и экспериментом, получившая название "загадка сверхтонкой структуры" [3]. Причиной расхождения оказалось неточное "стандартное" значение магнитного момента ядра  $^{209}\text{Bi}$ , которое приводится в справочниках. Этот магнитный момент был получен при интерпретации экспериментальных данных по ядерному магнитному резонансу в водном растворе нитрата висмута. При интерпретации были использованы грубые оценки константы экранирования магнитного момента ядра  $^{209}\text{Bi}$ , погрешность которых была сильно занижена.

В работе [1] нами был адаптирован метод релятивистских связанных кластеров для выполнения расчётов константы экранирования в молекулах на новом уровне точности. С использованием этого метода в работе [1] была выполнена интерпретация нового эксперимента по измерению ядерного магнитного резонанса на молекуле  $\text{NMe}_4\text{BiF}_6$ . В докладе будут даны детали развитого подхода, а также результаты его применения к различным системам для нахождения моментов ядер. В частности, будут представлены результаты уточнения магнитного момента ядра  $^{207}\text{Pb}$ .

*Исследование магнитного момента ядра  $^{209}\text{Bi}$  выполнено при поддержке гранта Президента № МК-2230.2018.2, а также гранта Фонда "БАЗИС" № 18-1-3-55-1.*

*Исследование магнитного момента ядра  $^{207}\text{Pb}$  и моментов других ядер выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10019).*

1. Skripnikov L.V., Schmidt S., Ullmann J., Geppert C., Kraus F., Kresse B., Nörtershäuser W., Privalov A.F., Scheibe B., Shabaev V.M., Vogel M., Volotka A.V. // Phys. Rev. Lett. 2018 T. 120 C. 093001.

2. V.M. Shabaev et al // Phys. Rev. Lett. 2001 T. 86 C. 3959.

3. J. Ullman et al // Nat. Commun. 2017 T. 8 C. 15484.

## Эффекты несохранения пространственной четности в молекуле ортоводорода

Д. В. Чубуков<sup>1,2</sup>, Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>, Л. Н. Лабзовский<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Теоретическое изучение эффектов нарушения пространственной четности (P-нечетных эффектов) в атомных и молекулярных системах представляет фундаментальный интерес. Данный интерес вызван тем, что прецизионный расчет таких эффектов и последующее сравнение с результатами экспериментов позволяет проверить и уточнить параметры электрослабого сектора стандартной модели. Заметим также, что эффекты несохранения четности достаточно чувствительны к различным расширениям стандартной модели.

В рамках данной работы теоретически исследовались P-нечетные эффекты в легких двухатомных гомоядерных молекулах, и был проведен детальный расчет эффектов несохранения четности для ортоводорода, у которого спины протонов выстроены параллельно. Таким образом изучались эффекты той части слабого электрон-ядерного взаимодействия, которая зависит от полного ядерного спина. Ранее этот эффект не наблюдался, так как его вклад было невозможно выделить на фоне другого более сильного P-нечетного эффекта, электромагнитного взаимодействия электронов с анапольным моментом ядра. Молекула ортоводорода, возможно, является единственной молекулярной системой, в которой ситуация обратная.

В связи со значительным прогрессом в лабораторных экспериментах в области внутрисполостной абсорбционной спектроскопии ICAS (англ. Intracavity Absorption Spectroscopy), в которых измерение P-нечетной активности проводится вдали от резонанса, где поглощение мало, а оптическая длина может быть сделана достаточно большой [1-2], исследование данных эффектов несохранения пространственной четности в легких двухатомных гомоядерных молекулах становится особенно важным. Было выполнено теоретическое моделирование соответствующих ICAS экспериментов и сделаны выводы о целесообразности их проведения.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 18-32-00150 мол\_а.*

1. V. M. Baev, T. Latz, and P. E. Toschek Appl. Phys. B (1999) 69, p. 171
2. L. Bougas, G. E. Katsoprinakis, W. von Klitzing, and T. P. Rakitzis Phys. Rev. A (2014) 89, p. 052127

## Моделирование электронной структуры галогенидов иттербия: кластеры, встроенные в кристалл

*В. М. Шахова<sup>1,2</sup>, Ю. В. Ломачук<sup>2</sup>, Д. А. Мальцев<sup>2</sup>, Н. С. Мосягин<sup>2</sup>, Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>,  
А. В. Зайцевский<sup>2,3</sup>, А. В. Титов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>3</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Материалы, содержащие f-элементы (лантаноиды и актиноиды), чрезвычайно интересны с практической точки зрения, поэтому методика теоретического изучения таких систем может быть мощным инструментом в решении многих как научных, так и практических задач. Однако теоретическое исследование различных свойств таких структур является сложной квантовохимической проблемой из-за слишком жестких требований для рассмотрения корреляционных и релятивистских эффектов, специфичных для f-элементов и их соединений.

В этом исследовании трудности, связанные с релятивистскими эффектами, были решены путем применения двухэтапного метода расчета соединений тяжелых атомов, разработанного нашей группой. На первом этапе вычисление электронной структуры проводилось с использованием точной версии релятивистского псевдопотенциала для тяжелых атомов [1]. Далее, апостериорное восстановление волновых функций вблизи ядра тяжелого атома выполнялось в интересующем нас атомном ядре [2]. В результате была получена матрица плотности, локализованная на тяжелом атоме. С помощью этой матрицы плотности были вычислены свойства, локализованные на атоме (свойства «атомов в соединениях» или свойства А-в-С).

Суть исследования - разработка методики построения оптимальных кластеров, встроенных в кристалл, и потенциала встраивания, описывающих взаимодействие кластера с окружающей средой. Модель встроенного кластера должна точно описывать электронную плотность в интересующей нас области, а также воспроизводить структурные параметры исходного кристалла. Важной особенностью кластера является то, что он должен быть относительно небольшим по размеру. Это необходимо для его дальнейшего изучения точными методами расчета, а именно методами связанных кластеров (СС), поскольку функциональная теория плотности (DFT) не всегда обеспечивает достаточную точность расчетов.

В работе были рассмотрены кристаллы фторидов, YbF<sub>2</sub> и YbF<sub>3</sub>, и хлоридов иттербия, YbCl<sub>2</sub> и YbCl<sub>3</sub>. Их кластерные модели были предложены и изучены в рамках DFT методов. Структурные параметры были оптимизированы. Химические сдвиги рентгеновских эмиссионных спектров (ХС РЭС) на атоме Yb были оценены по методике, разработанной нами ранее [3]. Результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными, что доказывает, что предложенная методика расчета очень перспективна.

1. Mosyagin, N.S.; Zaitsevskii, A.V.; Titov, A.V. Shape-Consistent Relativistic Effective Potentials of Small Atomic Cores, *International Review of Atomic and Molecular Physics // Review of Atomic and Molecular Physics*. 2010, №1(1). P. 63-72.

2. Titov, A.V.; Mosyagin, N.S.; Petrov, A.N.; Isaev, T.A.; DeMille, D.P. Study of P,T-parity Violation Effects in Polar Heavy-Atom Molecules // *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. 2006, №15. P. 253-283.

3. Lomachuk, Y.V.; Titov, A.V. Method for Evaluating Chemical Shifts of X-ray Emission Lines in Molecules and Solids // *Physical Review A*. 2013, №88. P. 062511.

## **Биомедицина и ядерная медицина**

## Изучение особенностей строения и биологической активности некоторых производных 2-дихлорметил-5-арил-2H-тетразолов

А. А. Батыренко<sup>1</sup>, О. В. Миколайчук<sup>2</sup>, Р. Е. Трифонов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Тетразолы являются известными фармакофорами. С целью получения новых биологически активных веществ вводят тетразолильный фрагмент, являющийся сугубо синтетическим фармакофором, в структуру уже известных лекарственных веществ или эндогенных соединений. Такие гибридные молекулы могут обладать уникальными свойствами. Именно таким образом удалось получить ряд высокоэффективных фармацевтических препаратов, обладающих низкой токсичностью и пролонгированным действием [1,2].

В данной работе была получена серия 2-дихлорметил-5арил-2Hтетразолов. Структура и состав соединений были описаны различными физикохимическими методами (ЯМР и ИК-спектроскопия, масс-спектрометрия и рентгеновская монокристаллическая дифракция). Данные РСА позволили выявить наличие в структуре изученных соединений внутримолекулярные неспецифические взаимодействия, обусловленные поляризацией  $\pi$ -орбиталей и образованием так называемой  $\pi$ -дырки.

Предположительно данные производные могут взаимодействовать со специфическими цитоплазматическими рецепторами, оказывая при этом противовоспалительное и противоаллергическое действие.

*Исследования выполнены с использованием ресурсов центров "Методы исследования состава вещества", "Рентгенодифракционные методы исследования" и "Магнитно-резонансные методы исследования" СПбГУ.*

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 17-13-01124).*

1. Ostrovskii V.A., Popova E.A., Trifonov R.E. Adv. Heterocyclic. Chem. 2017, 123, 1.
2. Ostrovskii V.A., Koldobskii G.I., Trifonov R.E. Comprehensive Heterocyclic Chemistry III. 2008, 6, 257.

## Клиническая дозиметрия в протонной терапии на СЦ-1000

*Д. С. Брожник, Н. И. Карнович, Н. А. Кузора, Ф. А. Пак, А. И. Халиков*

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

Основной задачей лучевой терапии является локальное воздействие на опухоль и одновременное сохранение здоровых окружающих тканей. Протонная лучевая терапия зарекомендовала себя как эффективный способ лечения онкологических заболеваний. В НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ на синхроциклотроне СЦ-1000 внедрен метод облучения “напролет”, который заключается в воздействии на внутричерепные мишени горизонтальным пучком протонов с энергией 1 ГэВ в комбинации с подвижной техникой облучения. Особенностью данной методики является возможность формирования пространственных распределений поглощённой дозы (дозных полей) малого размера с высоким пространственным градиентом, что важно при облучении внутричерепных областей, где близко расположены жизненно важные центры человека[1].

Основной задачей клинической дозиметрии является детальное описание дозного поля, создаваемого терапевтическим аппаратом в облучаемой части тела больного или дозиметрическом фантоме[2]. Дозиметрический фантом моделирует тело больного по анатомической форме, синтопии органов и тканей и физическим эффектам взаимодействия излучения с веществом. В клинической дозиметрии используются различные типы фантомов и дозиметров (ионизационные камеры, полупроводниковые детекторы, радиохромные пленки). Для каждой терапевтической установки, используемой в клинической практике, имеется свой набор измеряемых характеристик, процедур и методик привязки к дозе (расчет количества мониторных единиц на единицу поглощенной дозы). Ускоритель СЦ-1000 не является специализированной медицинской установкой, в группе протонной терапии разработана собственная методика привязки к дозе, основанная на измерении поглощенной дозы с помощью метода термолюминесцентной дозиметрии (ТЛД) и ионизационных камер. В изоцентр фантома помещается камера клинического дозиметра и при включенном пучке отсчитывается доза, равная 1Гр, параллельно программа облучения выдает количество импульсов, соответствующих заданной дозе. Таким образом, определяется число импульсов на 1Гр. Затем, для контроля точности привязки, в фантом одновременно с камерой помещается капсула с ТЛД и по рассчитанным мониторным единицам отпускается доза 2Гр. Данные с ТЛД получают методом термовысвечивания, результат сравнивается с отпущенной по клиническому дозиметру дозой.

Для приведения Комплекса протонной терапии на СЦ-1000 к современным стандартам высокотехнологичной медицинской помощи (ВМП) происходит обновление системы клинической дозиметрии.

В данной работе показаны экспериментальные результаты тестирования новой системы клинической дозиметрии, а также верификация с имеющимся оборудованием при использовании твердотельного фантома и капсул с ТЛД на пучке протонов с энергией 1 ГэВ. В дополнение, приводится примерный план дальнейших работ по проверке работоспособности нового дозиметрического оборудования.

1. А.М. Гранов, Л.А. Тютин, Р.А. Шалек, В.М. Виноградов, Д.Л. Карлин. Сорокалетний опыт клинического применения пучка протонов с энергией 1000 МэВ на базе синхроциклотрона Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова //Мед.физика. 2016 г. №2 (70). 10-17 с.

2. Е.С. Сухих Е.С. Клиническая дозиметрия фотонных и электронных пучков медицинских ускорителей на основе полимерных плёнок Gafchromic EBT-3. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Томск. 2015 г.

## Радиосинтез и оценка биологической активности меченных короткоживущими изотопами бифенилов – потенциальных радиотрейсеров для визуализации нейровоспаления

Д. Д. Ваулина<sup>1</sup>, О. Ф. Кузнецова<sup>1</sup>, Н. Б. Викторов<sup>2</sup>, К. В. Сивак<sup>3</sup>, Н. А. Гомзина<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт мозга человека им. Н. П. Бехтеревой РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Научно-исследовательский институт гриппа им. А. А. Смородинцева Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия

В последнее десятилетие процессы нейровоспаления в связи с их доказанной ролью в патогенезе нейродегенеративных заболеваний (болезни Альцгеймера, Паркинсона и т.д.) стали предметом многочисленных ПЭТ исследований [1]. Однако ни один из радиотрейсеров для визуализации биомаркеров нейровоспаления не обладает всеми необходимыми для ПЭТ характеристиками, поэтому поиск новых кандидатов является чрезвычайно актуальным. Известно, что 4'-О-метилхонокиол, лигнан из растения *Magnolia officinalis* обладает нейропротекторными и противовоспалительными свойствами [2]. Цель данной работы - синтез потенциальных ПЭТ радиотрейсеров на основе структуры 4'-О-метилхонокиола и оценка их биологической активности на модели нейровоспаления у крыс. В ходе работы было предложено ввести радионуклид углерод-11 методом <sup>11</sup>C-метилирования ( $T_{1/2} = 20,4$  мин) и фтор-18 методом <sup>18</sup>F-этилирования ( $T_{1/2} = 109,8$  мин) в алкоксигруппу 4'-О-метилхонокиола.

Предложенные радиотрейсеры получены с радиохимической чистотой > 99% и содержанием химических примесей с радиохимическим выходом – 20 и 35 % от активности радиоалкилирующих агентов, <sup>11</sup>CH<sub>3</sub>I и <sup>18</sup>FCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Br соответственно, (с поправкой на распад). Было проведено исследование *ex vivo* биораспределения производного 4'-О-метилхонокиола, меченного углеродом-11, на модели нейровоспаления, индуцированного липополисахаридом *E.Coli*. Согласно полученным данным наблюдалось повышенное накопление (в 4 раза) радиотрейсера в мозге у крыс с нейровоспалением и в 2 раза у крыс с предварительным введением целекоксиба – селективного ингибитора циклооксигеназы 2, по сравнению с интактными животными. Таким образом, было показано, что предложенный радиотрейсер проходит через гематоэнцефалический барьер и может быть использован в качестве радиолиганда для ПЭТ визуализации нейровоспаления. В настоящее время ведется работа по изучению биораспределения радиофторированного аналога 4'-О-метилхонокиола.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 17-04- 02119.*

1. Prata J., Santos S., Almeida M., Coelho R., Barbosa M.A., Bridging Autism Spectrum Disorders and Schizophrenia through inflammation and biomarkers - pre-clinical and clinical investigations // *J. Neuroinflammation*. 2017. V. 14. P. 179–212.

2. Kim H.S., Ryu H.S., Kim J.S., Kim Y.G., Lee H.K., Jung J.K., Kwak Y.S., Lee K., Seo S.Y., Yun J., Kang J.S., Hong J.T., Kim Y., Han S.-B., Validation of cyclooxygenase-2 as a direct antiinflammatory target of 4-O-methylhonokiol in zymosan-induced animal models. // *Arch. Pharm. Res.* 2015. V. 38. P. 813–825.

## Исследование разделения лютеция и иттербия методами жидкостной экстракции и экстракционной хроматографии

*Е. В. Васильева, Н. Д. Голецкий, М. М. Металиди, А. В. Мацкевич, Е. В. Амбул, Н. Г. Фирсин*

*АО «Радиевый институт им. В. Г. Хлопина», Санкт-Петербург, Россия*

Исследованы методы разделения лютеция и иттербия: экстракционная хроматография твердыми экстрагентами семейства LN и DGA и экстракция фосфорорганическими экстрагентами Д2ЭГФК (ди-2-этилгексил фосфорная кислота), Р-507 (моно-2-этилгексильный эфир 2-этилгексилфосфоновой кислоты) и Суапех 272 (ди(2,2,4-триметилпентил) фосфиновая кислота) из хлоридных и нитратных растворов.

Наработан массив экспериментальных данных и определены оптимальные условия сорбционной и экстракционной технологии разделения элементов и оценены возможности применения данных экстрагентов для получения моноизотопного лютеция-177.

Реализация данных методов в промышленном разделении лютеция и иттербия возможна, причем технология для обеспечения наилучшего результата должна быть комбинированной. Экстракцию можно применять для разделения основной части Yb от Lu, а экстракционную хроматографию – для доочистки.

Окончательное разделение лютеция и иттербия рекомендовано осуществлять методом экстракционной хроматографии. Смолы LN являются перспективными для разделения лютеция и иттербия данным методом. Были получены высокие коэффициенты распределения при кислотностях 0,1-0,3 моль на смолах семейства LN и высокие коэффициенты разделения.

На основании полученных экспериментальных данных составлены Исходные Данные для создания в АО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина» участка по производству <sup>177</sup>Lu мощностью 2-50 Ки/нед.

1. Horwitz, E.P. A process for the separation of <sup>177</sup>Lu from neutron irradiated <sup>176</sup>Yb targets / E.P. Horwitz, D.R. McAlister, A.H. Bond, R.E. Barrans, J.M. Williamson // Applied Radiation Isotopes. – 2005. – № 63. – P. 23-36.

2. Production of <sup>177</sup>Lu for targeted radionuclide therapy: available options / A. Dash, F. Furn, Jr. Knapp // Nuclear Medicine and Molecular Imaging. – 2014. – № 49 (2). – P. 85-107.

## **Изучение молекулярно-массовых характеристик и мицеллообразования в растворе амфифильных олигомеров, использующихся для инкапсулирования лекарств**

*Е. В. Ивановская, Т. С. Серегина, И. А. Деревнин, В. В. Мендруль, А. Л. Лусс, В. А. Дятлов*

*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

Эндкепированный амфифильный поливинилпирролидон, а также поверхностно-активные олигомеры на основе аддуктов по двойной связи эфиров 2-цианоакриловой кислоты применяются в качестве нанокорпускулярных носителей лекарств и генов [1]. Их эффективность решающим образом зависит от размера самоорганизующихся капсул, которая определяется молекулярной массой олигомеров, формирующих стенку и способом инкапсулирования лекарств [2].

Измерение молекулярно-массовых характеристик поверхностно-активных полимеров и олигомеров, образующих ассоциаты в растворах, остается труднорешаемой научной и практической задачей. В настоящей работе предложена методика определения молекулярно-массовых характеристик и размеров асоциатов поверхностно-активных олигомеров в органических растворителях с использованием комбинации трех физико-химических методов: динамического светорассеяния, статического многоугольного светорассеяния, гель-проникающей хроматографией с двойным детектированием, рефрактометрическим и матричным ультрафиолетовым детекторами. Кроме того в работе изучено влияние способов инкапсулирования протеонамида в капсулы аддукта этил-2-цианакрилата с жирными спиртами на размер и характер полученных носителей.

### **Вывод:**

1. Из всех исследованных методов определения молекулярно массовых характеристик и размеров мицелл для измерения молекулярной массы подходит метод концевых групп ЯМР и ГПХ в органическом растворителе. Статическое светорассеяние не пригодно для определения молекулярных масс и дает сильно завышенные результаты.

2. Исследованные полимеры образуют в растворе мицеллы двух типов (однослойные и двухслойные) однако в случае инкапсулирования гидрофобных веществ образуются только однослойные мицеллы.

3. Разработаны подходы, позволяющие синтезировать корпускулярные носители лекарств и контролировать их размер в широких пределах от десятков нанометров до десятков микрон (мкм).

4. Используемые подходы позволяют получать как полые нанокapsулы, так и пористые частицы. Основой для синтеза носителя являются (временно поверхностно-активные аддукты по двойной связи 2-цианакрилатов с жирными спиртами).

1.Dyatlov V.A., Maleev V.I. Intermediates for the preparation of poly(2-cyanoacrylates) and applications of the poly(2-cyanoacrylates) so prepared. Int. Application No PCT/IE 94/000018, 1994, Int. Publication No WO95/026371, 1995.

2.Dyatlov V.A., Katz G.A. Small diameter nanocapsules, process for their preparation and application thereof. Int. Application No PCT/IE 94/000001, Int. Publication No WO94/015590, 1994.

## **Автоматизированная система управления технологическим процессом для онкофтальмологического комплекса протонной лучевой терапии**

*В. О. Карпунин, В. Н. Кончиков, И. Н. Ерохин*

*НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ, Москва, Россия*

При создании специализированного онкофтальмологического комплекса протонной лучевой терапии (далее Комплекс) следует выделить основную автоматизированную систему управления технологическим процессом (АСУ ТП) ПЛТ. АСУ ТП является информационной системой верхнего уровня, регламентирующей взаимодействие всех составных частей Комплекса, обеспечивающей эффективность работы персонала и, соответственно, облегчающей прохождение процедур пациентом. Система представляет собой комплекс программных, технических, информационных, лингвистических, организационно-технологических средств и действий квалифицированного персонала, предназначенный для решения задач управления различными видами деятельности Комплекса.

Объектом автоматизации АСУ ТП является технологический процесс лучевого лечения с целью повышения его эффективности. Система осуществляет информационную связь и управление Комплексом посредством специализированных модулей, которыми являются информационные подсистемы Комплекса, отвечающие за автоматизацию отдельных этапов технологии ПЛТ:

- радиологическая информационная система;
- система дозно-анатомического планирования облучения;
- система позиционирования пациента;
- автоматизированная система управления лучевой установкой;
- системы клинической дозиметрии, формирования индивидуальных дозовых распределений и мониторинга пучка и поглощённой дозы;
- система хранения и обработки дозиметрических данных;

Автоматизированная радиологическая информационная система (РИС) создаётся в Комплексе с целью информационного обслуживания при реализации технологического процесса ПЛТ, в том числе для автоматизации процессов комплексной топографии, организации информационных потоков, обеспечивающих процесс планирования облучения, передачу информации о результатах планирования системам, обеспечивающих исполнение плана, протоколирование плана и диагностический контроль последствий лучевого лечения.

Для автоматизации процесса планирования ПЛТ в составе АСУ ТП предусмотрена система дозно-анатомического планирования (СДАП) облучения. Планирование протонного облучения для лечения внутриглазных новообразований, имеет свои особенности [1,2], что не позволяет использовать стандартные подходы. Выходной информацией СДАП является план облучения (включая итоговое дозовое распределение), который посредством РИС передаётся в системы, обеспечивающие его исполнение.

Системы мониторинга пучка и поглощённой дозы обеспечивают Комплекс аппаратными средствами наблюдения за пучком: формой, размерами и положением его поперечного сечения относительно выбранной оси прохождения пучка от места его ввода в процедурную кабину до изоцентра лучевой установки. Мониторы поглощённой дозы предназначены мониторинга текущего значения величины поглощённой дозы в облучаемой мишени в процессе проведения сеанса ПЛТ. Для обработки, хранения и оперативного доступа к дозиметрическим данным в АСУ ТП предусматривается Система хранения и обработки дозиметрических данных, которая также предоставляет дозиметристу или медицинскому физика сервисы обработки и анализа этих данных.

Для автоматизации управления всей аппаратурой, установленной на лучевой установке (кресло-позиционер, устройства формирования пучка и системы позиционирования и т.д.) предназначена система управления лучевой установкой (АСУ ЛУ).

1. В.С. Хорошков, С.В. Саакян, В.И. Люлевич, Д.Г. Орлов, И.Н. Ерохин и др. Инновационные разработки технических средств для протонной терапии внутриглазных новообразований. Часть I // Российский офтальмологический журнал 2015, №2, с.14-20.

2. В.С. Хорошков, С.В. Саакян, В.И. Люлевич, Д.Г. Орлов, И.Н. Ерохин и др. Инновационные разработки технических средств для протонной терапии внутриглазных новообразований. Часть II // Российский офтальмологический журнал 2016, № 2, с.11-17.

## **Система дозно-анатомического планирования для протонной лучевой терапии онкофтальмологических больных**

*Д. Г. Орлов*

*НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ, Москва, Россия*

Несколько последних десятилетий для лечения злокачественных новообразований (ЗН) успешно применяется протонная лучевая терапия. Это конформный способ формирования дозового распределения в теле пациента позволяет создать поле, оптимально объемлющее опухоль, и тем самым, не только получить хороший локальный контроль, но и минимизировать дозовую нагрузку на здоровые ткани.

Лечение ЗН локализованных в глазу пациента имеет ряд особенностей от общего подхода в ПЛТ. Существенная однородность структур глаза не позволяет их однозначно дифференцировать по топометрическим данным в виде КТ томограмм, что является стандартным для других локализаций. Также подвижность глаза требует дополнительных методов для фиксации положения опухоли-мишени на время облучения.

Все это необходимо учитывать при проведении планирования облучения глаза как при работе с топометрическими данными пациента, так и при выборе оптимального плана облучения мишени. Мы рассмотрим методы, применяемые при планировании облучения, позиционировании и непосредственно облучение ЗН [1]. Отдельное внимание будет уделено особенностям строения глаза [2] и влияния их на технологию и точность проводимых процедур.

1. Бородин Ю.И., Вальский В.В., Ерохин И.Н., Канчели И.Н., Ломанов М.Ф., Люлевич В.И., Орлов Д.Г., Саакян С.В., Хорошков В.С., Черных А.Н. Инновационные разработки технических средств для протонной терапии внутриглазных новообразований // Часть I, Российский офтальмологический журнал. 2015. Т. 8. № 2. С. 14-20; Часть II, Российский офтальмологический журнал. 2016. Т. 9. № 2. С. 11-17.

2. Орлов Д.Г., Владимирова О.М., Ерохин И.Н., Ломанов М.Ф., Саакян С.В., Вальский В.В., Бородин Ю.И. Представление модели глаза для использования в системе дозноанатомического планирования лучевой терапии внутриглазных новообразований // Российский офтальмологический журнал. 2013. Т. 6. № 4. С. 48-54.

## Синтез и антигриппозная активность 2-адамantan-1-ил-5-арил-2H-тетразолов

Д. В. Спасибенко<sup>1</sup>, О. В. Миколайчук<sup>2</sup>, Р. Е. Трифонов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Адамantan и его производные являются биологически активными веществами и входят в состав многих лекарственных препаратов. Известно, что адамантановые производные тетразола, проявляют высокую противовирусную активность. Ранее был получен ряд адамантановых производных тетразола, исследована их токсичность и противовирусная активность [1]. Было показано, что некоторые адамантантетразолы характеризуются индексом селективности (SI) в отношении вируса гриппа А вплоть до 150 ед. [2].

В данном исследовании была синтезирована серия 2-адамantan-1-ил-5-арил-2H-тетразолов. Полученные соединения были охарактеризованы различными физико-химическими методами: ЯМР и ИК-спектроскопия, массспектрометрия и рентгеноструктурным анализом. Для всех соединений была определена активность в отношении вируса гриппа А.

*Все исследования выполнены в ресурсных центрах "Методы исследования состава вещества", "Рентгенодифракционные методы исследования" и "Магнитно-резонансные методы исследования" СПбГУ.*

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 17-13-01124).*

1. Попова Е.А., Трифонов Р.Е., Островский В.А., Успехи химии, 2019, 88, 644.

2. Зарубаев В.В., Трифонов Р.Е., Сулонов В.В., Селиверстова Д.В., Журнал органической химии, 2018, 54, 630.

**Биофизика, молекулярная биология, генетика**

## **Влияние УФ-света на экспрессию гена RNR3 дрожжей *Saccharomyces cerevisiae***

***Е. А. Алексеева, Д. В. Федоров, Ю. А. Ильина, Т. А. Евстюхина, В. Т. Пешехонов,  
В. Г. Королев***

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

Для стабильного существования клетке необходим строительный материал, который она сможет использовать для воспроизведения генетического материала (репликация) и восстановления его структуры (репарация) после воздействия на него повреждающих агентов химической или физической природы. Таким строительным материалом, являются дезоксинуклеотидтрифосфаты (dNTP (dATP, dTTP, dGTP, и dCTP)).

В синтезе dNTP участвует рибонуклеотид редуктазный комплекс RNR. У дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* в состав этого комплекса входят две каталитические субъединицы Rnr1 и Rnr3. Эти субъединицы соответственно являются продуктами генов RNR1 и RNR3 [1,2].

Мы предполагаем, что уровень dNTP в клетке дрожжей может влиять на частоту УФ-индуцированного мутагенеза. Для проверки данного предположения мы при помощи ПЦР в реальном времени измерили уровень экспрессии гена RNR3, продукт которого входит в комплекс RNR, у штамма дикого типа (11D-3031) и мутантного штамма, с делецией по гену HIM1(6BSVK-312), без индукции, и с индукцией УФ-светом (180 сек).

Мы увидели, что уровень экспрессии гена RNR3 без индукции УФ-светом у штамма дикого типа и мутанта *him1* практически не отличаются. В то время как, при индукции УФ-светом уровень экспрессии гена RNR3 у штамма дикого типа примерно в три раза выше, чем у мутанта *him1*.

Мы предполагаем, что большая концентрация dNTP может способствовать уменьшению предмутационных событий в клетке, а следовательно уменьшению частоты УФ-индуцированных мутаций.

*Работа поддержана грантом РФФИ № 18-34-00540 мол\_а.*

1. Isaac Corcoles-Saez, Jean-Luc Ferat, et al. Functional link between mitochondria and Rnr3, the minor catalytic subunit of yeast ribonucleotide reductase // 2019, *Microbial Cell*, V. 6, № 6, P. 286- 296, doi: 10.15698/mic2019.06.680

2. D. Kumar, J. Viberg, et al. Highly mutagenic and severely imbalanced dNTP pools can escape detection by the S-phase checkpoint // 2010, *Nucleic Acids Research*, V. 38, № 12, P. 3975–3983, doi:10.1093/nar/gkq128

## **Исследование влияния хронической эндогенной стимуляции нейротрофического фактора BDNF на функциональное состояние митохондрий головного мозга**

***Т. А. Астраханова, М. Д. Уразов, Е. В. Митрошина, А. А. Бабаев, Т. А. Мищенко,  
М. В. Ведунова***

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

Многочисленными результатами экспериментальных исследований доказано, что нейротрофический фактор BDNF оказывает выраженное нейропротекторное действие при воздействии гипоксии-ишемии [1, 2]. Мы предполагаем, что эндогенная активация экспрессии нейротрофического фактора BDNF может стать эффективным подходом к коррекции гипоксических состояний, чем применение рекомбинантного белка. Целью работы явилось изучение влияния гиперэкспрессии нейротрофического фактора BDNF посредством применения аденоассоциированного вирусного вектора на функциональное состояние митохондрий, как наиболее чувствительному к гипоксическому повреждению компартменту клетки.

Объектом исследований служили мыши линии C57Bl/6. В первые часы жизни в латеральные желудочки головного мозга новорожденных мышат проводилось инъекирование оригинального аденоассоциированного вирусного вектора AAV-Syn-BDNF-eGFP, несущего последовательность гена BDNF и зеленого флуоресцентного белка EGFP. По достижении полуторамесячного возраста животные подвергались воздействию острой гипобарической гипоксии (ОГБГ) путем однократного подъема в вакуумной проточной барокамере на высоту 10000-10500 м (170-185 мм рт. ст.). Экспериментальное животное находилось на моделируемой высоте в течение 10 минут либо до появления первого агонального вдоха. Через 24 часа проводилась регистрация скорости потребления кислорода митохондриями головного мозга с помощью респирометра высокого разрешения OxuGraph-2k (Oroboros, Австрия). Оценивали следующие параметры: V4 – дыхание на экзогенных субстратах (5 мМ глутамат, 5 мМ малат или 10 мМ сукцинат), но в отсутствии АДФ; V3 – скорость дыхания митохондрий при окислительном фосфорилировании (в присутствии субстратов окисления и АДФ), а также степень сопряжения дыхательной цепи митохондрий - отношение V3/V4.

Показано, что в условиях нормоксии эндогенная стимуляция продукции нейротрофического фактора BDNF приводит к повышению соотношения V3/V4 ( $6,90 \pm 0,77$ ) относительно интактной группы ( $5,30 \pm 0,17$ ) ( $p \leq 0,01$ , критерий Манна-Уитни). При гипоксическом повреждении хроническая эндогенная стимуляция BDNF оказывает нейропротективный эффект путем поддержания дыхания митохондрий в состоянии V4 при окислении субстрата сукцината. Кроме того, накопление BDNF не только препятствует падению показателей состояния V3 после эпизода ОГБГ, но и приводит к их достоверному повышению относительно интактных значений ( $p \leq 0,01$ , критерий Манна-Уитни). Активация синтеза нейротрофического фактора BDNF также способствует сохранению степени сопряжения окисления и фосфорилирования в дыхательной цепи митохондрий. Если в группе «Гипоксия» показатель V3/V4 снижался на 30% относительно интактных значений, то в случае группы с применением вирусного вектора AAV-Syn-BDNF-eGFP по соотношению V3/V4 достоверных различий не обнаружено ( $p \leq 0,01$ , критерий Манна-Уитни).

*Работа выполнена в рамках государственного задания (проекты 17.3335.2017/4.6 и 6.6379.2017/8.9), а также при поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-1485.2019.4).*

1. Vedunova M. V. et al. TrkB-mediated neuroprotective and antihypoxic properties of brain-derived neurotrophic factor // Oxidative medicine and cellular longevity. – 2015. – Vol. 2015.

2. Chen A. I. et al. The neuroprotective roles of BDNF in hypoxic ischemic brain injury // Biomedical reports. – 2013. – Vol. 1. №. 2. – P. 167-176.

## Уровень мРНК и белка гена альфа-синуклеина в CD45+ клетках периферической крови у пациентов с болезнью Паркинсона с деменцией

А. И. Безрукова<sup>1</sup>, М. А. Николаев<sup>1,2</sup>, Д. Г. Кулабухова<sup>1</sup>, А. К. Емельянов<sup>1,2</sup>,  
И. В. Милюхина<sup>4</sup>, Ю. А. Бельцева<sup>3</sup>, Н. М. Захарова<sup>3</sup>, С. Н. Пчелина<sup>1,2,4</sup>, Т. С. Усенко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> ПСПбГМУ им И. П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> НМИЦ ПН им. В. М. Бехтерева Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

Введение. Синуклеинопатии являются группой нейродегенеративных заболеваний, которая характеризуется накоплением и агрегацией белка альфасинуклеина в нейронах и глиии [1]. К наиболее распространенным синуклеинопатиям относятся болезнь Паркинсона (БП) и деменция с тельцами Леви (ДТЛ). ДТЛ имеет сходные клинические и патологические признаки с БП на ранней стадии, что в свою очередь затрудняет постановку точного диагноза [2]. На сегодняшний день не существует уникальных биологических маркеров для дифференциации БП и ДТЛ.

Цель данного исследования заключалась в оценке уровня мРНК и белка гена альфа-синуклеина в CD45+ клетках периферической крови у пациентов с БПД, БП, ДТЛ и неврологически здоровых индивидуумов.

Материалы и методы. В исследование вошли 20 пациентов с БПД, 31 пациент с ДТЛ, 87 пациентов с БП с отсутствием деменции и 95 неврологически здоровых индивидуумов (контроль), сопоставимых между собой по полу и возрасту. Однородная фракция CD45+ клеток периферической крови всех участников исследования была получена методом центрифугирования в градиенте плотности раствора фиколла с последующей магнитной сепарацией лимфоцитарной фракции от других клеток крови с использованием магнитного ручного сепаратора MACS (Miltenyi Biotec, США). Уровень мРНК гена альфа-синуклеина в CD45+ клетках периферической крови оценивался методом количественной ПЦР в режиме реального времени с использованием коммерческого набора, содержащего краситель-интеркалятор SYBRGreen 1 (SsoI SyberGreen, Bio-Rad, США). В качестве референсного гена был использован конститутивно экспрессирующийся в клетках ген GNB2L1 (guanine nucleotide binding protein (G protein), beta polypeptide 2-like). Уровень альфа-синуклеина в CD45+ клетках оценивался методом иммуноферментного анализа (ИФА) с использованием набора Human alpha-synuclein ELISA kit (Invitrogen, США).

Результаты. В группе пациентов с БПД относительный уровень мРНК гена альфа-синуклеина был достоверно повышен по сравнению с пациентами с БП и контрольной группой (p<0.05). Уровень белка альфа-синуклеина был достоверно повышен в группе пациентов с БПД по сравнению с пациентами с БП, ДТЛ и контрольной группой (p=0,011, p=0.0019, p=0,0029, соответственно). Статистически значимых различий в уровне белка альфа-синуклеина между группами пациентов с ДТЛ, БП и контрольной группой выявлено не было (p>0,05).

Заключение. Проведенное нами исследование выявило, что повышенный уровень мРНК и уровень белка гена альфа-синуклеина в CD45+ клетках периферической крови могут быть ассоциированы с развитием деменции при БП.

*Исследование поддержано грантом РФФИ N 18-315-00387 мол-а.*

1. Campbell TN, Choy FY. Gaucher disease and the synucleinopathies: refining the relationship. Orphanet J Rare Dis, 2012. - V.7, №12.

2. Shi M, Huber BR, Zhang J. Biomarkers for cognitive impairment in Parkinson disease. Brain Pathol, 2010. - V.20, №3, P.660-71.

## Уровень белка альфа-синуклеина и цитокиновый профиль крови пациентов с синуклеинопатиями с деменцией

Д. А. Богданова<sup>1</sup>, Т. С. Усенко<sup>1,2</sup>, М. А. Николаев<sup>1,2</sup>, А. И. Безрукова<sup>1</sup>, Д. Г. Кулабухова<sup>1,2</sup>,  
Е. В. Грачева<sup>3</sup>, И. В. Милюхина<sup>3</sup>, Ю. А. Бельцева<sup>4</sup>, Н. М. Залутская<sup>4</sup>, А. А. Тимофеева<sup>1</sup>,  
С. Н. Пчелина<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> ПСПбГМУ им И. П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> НМИЦ ПН им. В. М. Бехтерева Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия

**Введение.** Болезнь Паркинсона и деменция с тельцами Леви относится к группе заболеваний, называемых синуклеинопатиями, в основе патогенеза которых лежит формирование агрегатов белка альфа-синуклеина в определенных областях головного мозга. Последние исследования указывают на ключевую роль нейровоспаления в патогенезе ДТЛ и БП [1,2,3,4]. Некоторые авторы выявляют ассоциацию нейровоспаления с развитием когнитивного дефицита при БП и ДТЛ [5]. Предполагают, что агрегация альфа-синуклеина может индуцировать иммунный ответ, который в свою очередь возможно ассоциирован с когнитивными нарушениями.

**Цель** данного исследования заключалась в оценке уровня белка альфасинуклеина в CD45+ клеток периферической крови и цитокинового профиля плазмы крови пациентов с БП, БП с деменцией (БПД), ДТЛ и неврологически здоровых индивидуумов.

**Материалы и методы.** В исследование вошли пациенты с БПД (n=15, 9 женщин, средний возраст: 68,2±8,4 года, средний возраст начала 64,5±8,3 года), ДТЛ (n=22, 13 женщин, средний возраст: 69,7±9,4 лет, средний возраст начала 67,4±10,1 лет), БП с отсутствием деменции (n=60, 38 женщин, средний возраст: 68,1±8,3 лет, средний возраст начала: 64,0±8,3 лет) и неврологически здоровые индивидуумы (контроль) (n=58, 33 женщины, средний возраст: 65,9±8,4 лет). Однородная фракция CD45+ клеток периферической крови всех участников исследования была получена методом центрифугирования в градиенте плотности раствора фиколла (Ficoll-Paque PLUS, GE Healthcare) с последующей магнитной сепарацией лимфоцитарной фракции от других клеток крови с использованием магнитного ручного сепаратора MACS (Miltenyi Biotec, США). Уровень альфа-синуклеина в CD45+ клетках оценивался методом иммуноферментного анализа (ИФА) с использованием набора Human alphasynuclein ELISA kit (Invitrogen, США). Уровень двенадцати цитокинов в плазме крови всех участников исследования (ИФН-гамма, ИЛ-2, ИЛ-4, ИЛ-6, ИЛ-10, ИЛ-12, ИЛ-13, ИЛ-21, ИЛ-23, ИЛ-1-бета, ФНО-альфа, МХП-1) анализировали методом мультиплексного анализа по технологии Luminex xMAP на анализаторе Luminex MagPix (Luminex Corporation, Austin, TX, USA) с использованием наборов (Milliplex MAP Human Cytokine/Chemokine Magnetic Bead Panel (HCYTOMAG-60K, Merk-Millipore, USA)) в соответствии с инструкцией производителя. Полученные результаты представлены в виде медианы (мин -макс)

**Результаты.** Уровень белка альфа-синуклеина составил для пациентов с БП 6,355 (0,505-36,800) нг/мл, БПД – 12,570 (4,975-25,875) нг/мл, ДТЛ – 4,503 (0,361-30,435) нг/мл и контроля – 6,720 (1,210-28,100) нг/мл. Уровень белка альфа-синуклеина был достоверно повышен у пациентов с БПД по сравнению с пациентами ДТЛ, БП и контрольной группой (p=0,0011, p=0,0256, p=0,0080, соответственно). Концентрация провоспалительных цитокинов ФНО-альфа, ИФН-гамма и ИЛ-6 в плазме крови пациентов с ДТЛ (15.49(5.41-29.45)пг/мл, 2.04(0.78-7.34)пг/мл, 1.82(0.56-41.91)пг/мл, соответственно) была повышена по сравнению с группой пациентов с БП (10.64(4.96-18.82)пг/мл, 0.67(0.01- 3.20)пг/мл, 0.32(0.005-3.40)пг/мл, соответственно) (p=0.0249, p=0.0386, p=0.0328, соответственно). Уровень ФНО-альфа плазмы крови был повышен в группе пациентов с БПД (15.31(6.22-30.02)пг/мл) по сравнению с БП (10.64(4.96-18.82)пг/мл). Достоверных различий в уровнях цитокинов плазмы крови в группах БПД и ДТЛ выявлено не было (p>0.05).

Множественный линейный регрессионный анализ показал ассоциацию между уровнем белка альфа-синуклеина в CD45+ клетках периферической крови и уровнем цитокинов (ИЛ-2, ИЛ-10, ИЛ-4, ИЛ-21, ИЛ-12, МХП-1, ИЛ-6, ИЛ-1-бета) ( $p < 0,013$ ,  $F = 2,935$ ,  $R^2 = 0,13$ ).

**Заключение.** Результаты данного исследования продемонстрировали, что развитие деменции при синуклеинопатиях связано с повышенным уровнем провоспалительных цитокинов в плазме крови, который в свою очередь ассоциирован с уровнем белка альфа-синуклеина .

*Исследование поддержано грантом РФФИ N 18-315-00387 мол-а.*

1. Howes O, McCutcheon R. Inflammation and the neural diathesis-stress hypothesis of schizophrenia: a reconceptualization Translational Psychiatry. 2017. - V.7, №2 P. 1024.
2. Garcia-Esparcia P, et al. Mitochondrial activity in the frontal cortex area 8 and angular gyrus in Parkinson's disease and Parkinson's disease with dementia Brain Pathology. 2017. - V.28, №1 P. 43-57
3. Iannaccone S, et al. In vivo microglia activation in very early dementia with Lewy bodies, comparison with Parkinson's disease. Parkinsonism & Related Disorders. 2013. - V.19, №1 P. 47-52.
4. Cerami C, et al. Molecular Imaging of Neuroinflammation in Neurodegenerative Dementias: The Role of In Vivo PET Imaging. International Journal of Molecular Sciences. 2017. - V.18, №5 P. 993.
5. Lindqvist et al., Cerebrospinal fluid inflammatory markers in Parkinson's disease-- associations with depression, fatigue, and cognitive impairment. Brain Behav Immun. 2013. - V.33 P.183-9.

## Роль гар-контактов в регуляции функциональной кальциевой активности астроцитов в норме и при моделировании гипоксии *in vitro*

Д. Е. Бурмистров, Т. А. Мищенко, М. В. Ведунова, Е. В. Митрошина

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

В настоящее время для нейробиологии большой интерес представляет дискуссионный вопрос о существовании астроцитарных сетей и о роли щелевых межклеточных контактов (gap-junctions) между астроцитами. Особое внимание уделяется исследованиям, посвященным изучению межклеточных взаимодействий как в норме, так и при моделировании различных патологий центральной нервной системы, в том числе при ишемическом повреждении [1,2]. Целью данной работы являлось исследование роли гар-контактов в регуляции функциональной кальциевой активности в норме и при гипоксическом повреждении, как одном из факторов ишемии.

В ходе исследования использовались первичные культуры астроцитов коры головного мозга новорожденных мышей линии C57Bl/6. Моделирование нормобарической гипоксии осуществлялось на 14 день культивирования путем замены культуральной среды на гипоксическую в течение 30 минут. Оценка функциональной кальциевой активности проводилась с применением флуоресцентного кальциевого зонда Oregon Green 488 и конфокального лазерного сканирующего микроскопа Zeiss LSM 510 (Zeiss, Германия). Для блокады гар-контактов применялся селективный блокатор коннексинов 43 - Gap19 (100мкМ). Для активации пуриnergических рецепторов P2Y и P2X использовался раствор АТФ (10 мкМ).

Установлено, что активация пуриnergических рецепторов в норме стимулировала спонтанную кальциевую активность, что проявлялось в достоверном увеличении в 1,9 раза частоты (с  $0,61 \pm 0,01$  до  $1,15 \pm 0,02$  осц/мин) и снижении длительности кальциевых осцилляций (с  $12,00 \pm 0,1$  до  $10,27 \pm 0,07$ с). При моделировании гипоксии аппликация АТФ также приводила к достоверному увеличению частоты кальциевых осцилляций, однако менее выраженному – в 1,3 раза (с  $1,89 \pm 0,1$  осц/мин до  $1,41 \pm 0,08$  осц/мин).

Показано, что блокада коннексинов 43 в норме приводило к незначительному увеличению частоты осцилляций по сравнению с базовым уровнем (в 1,26 раза) и увеличению длительности осцилляций (до  $16,14 \pm 0,17$ с). Аппликация АТФ на фоне применения селективного ингибитора коннексинов 43 не вызывала достоверного изменения основных параметров кальциевой активности.

*Работа выполнена в рамках государственного задания (проекты 17.3335.2017/4.6 и 6.6379.2017/8.9), а также при поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-1485.2019.4).*

1. Yin X. et al. Roles of astrocytic connexin-43, hemichannels, and gap junctions in oxygen-glucose deprivation/reperfusion injury induced neuroinflammation and the possible regulatory mechanisms of salvianolic acid B and carbenoxolone // Journal of neuroinflammation. – 2018. – Vol. 15. №. 1. – P. 97.

2. Ma D. et al. Astrocytic gap junction inhibition by carbenoxolone enhances the protective effects of ischemic preconditioning following cerebral ischemia // Journal of neuroinflammation. – 2018. – Vol. 15. №. 1. – P. 198.

## Биоэлектрохимический датчик на основе новых электродных материалов для тестирования антимикробных препаратов

*Е. В. Вахрушева, А. А. Соломенникова, А. Ф. Сафиуллина*

*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

Важным направлением исследований для решения проблемы антибиотикорезистентности является разработка методов тестирования новых лекарственных форм антимикробных препаратов, а также решение обратной задачи – исследование чувствительности конкретных штаммов к таким препаратам. Для этих целей наиболее перспективными являются технологии «lab-on-chip» [1], одним из ключевых элементов которых являются датчики, контролирующие жизнеспособность и метаболическую активность микробных клеток. На наш взгляд, этим задачам наиболее отвечают электрохимические сенсоры [2], для совершенствования которых целесообразно использовать новые электродные материалы, получаемые методами высокоскоростного лазерного синтеза (ВЛС). [3].

Целью работы стало получение методом ВЛС нового электродного материала и исследование его вольтамперных характеристик в присутствии клеток *Escherichia coli* при воздействии гентамицина.

Для изготовления электродов на поверхность графитового рабочего электрода наносили спиртовые растворы солей рутения и платины. После высушивания электроды обрабатывали оптоволоконным лазером на воздухе в импульсном режиме. Поверхность электродов исследовали с помощью сканирующего электронного микроскопа. Взвесь микробных клеток в фосфатно-солевом буферном растворе (ФСБ) наносили на поверхность рабочего электрода и оставляли во влажной камере для адсорбции. Электрохимические исследования осуществляли на потенциостатемикроамперметре «ЭкоЛаб-2А». Фоновым электролитом служил ФСБ с добавлением гентамицина.

Электронная микроскопия показала формирование развитой поверхности электродного материала после ВЛС. При ЦВА, электроды демонстрируют воспроизводимые характеристики в диапазоне потенциалов от +1000 до -1000 мВ. ВЛС приводит к росту емкостных токов, что объясняется увеличением площади электрода при обработке. При нанесении клеточной взвеси емкостные токи снижаются, что может быть свидетельством адсорбции клеток, частично блокирующих поверхность электрода. Внесение в ячейку гентамицина привело к формированию в диапазоне потенциалов -500 ...-1000 мВ пика восстановления, отсутствующего на ЦВА в бесклеточной системе, что позволяет связать его с реакцией клеток на антибиотик.

Дальнейшим развитием исследования станет формирование базы вольтамперометрических данных, отражающих влияние количества клеток, возраста культуры, концентрации и времени действия антибиотика на результат 220 амперометрии, а интеграция электрохимического датчика в микрофлюидный чип, позволяющий исследовать комбинации антимикробных препаратов.

1. An integrated microfluidic system for antimicrobial susceptibility testing with antibiotic combination / W.-B. Lee, C.-C. Chien, H.-L. You et al. // *Lab Chip*. Royal Society of Chemistry. – 2019. – Vol. 19, № 16. – P. 2699-2708.

2. Электрохимическая оценка метаболической активности клеток родококков, иммобилизованных на планарном графитовом электроде / И.А. Черенков, Т.Н. Кропачева, Е. А. Перевозчиков [и др.] // *Технологии живых систем*. – 2015. – Т. 12, № 2. – С. 12-19.

3. Писарева Т.А., Харанжевский Е.В., Решетников С.М. Синтез нанокристаллического графита для электродов суперконденсаторов методом короткоимпульсной лазерной обработки полиимидной пленки // *Журнал прикладной химии*. – 2016. – Т. 89, № 6. – С. 736- 743.

## **Интерполиэлектролитные комплексы для генной терапии. Взаимодействие молекулы ДНК с синтетическими полимерами в растворе**

*П. В. Габрусёнок, В. М. Бакулев, Н. А. Касьяненко*

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

Несмотря на появление новых технологий, направленных на редактирование генома, использование генных векторов, содержащих рекомбинантную ДНК с нужным геном, и в настоящее время являются весьма востребованными объектами биотехнологических разработок. Основной задачей при формировании таких структур является компактизация ДНК в растворе. При формировании генных векторов необходимо подобрать компактизирующий агент, способный защищать ДНК от агрессивных факторов при ее транспортировке к клеткам-мишеням, который не проявлял бы высокой токсичности, и не вызывал других нежелательных побочных эффектов. Среди невирусных генных векторов бесспорное преимущество имеют векторы, формируемые на основе ДНК-полимерных комплексов [1; 2]. При этом использование биоразлагаемых полимеров позволит решить достаточно остро стоящий в настоящее время вопрос об утилизации используемых при создании генных векторов компонентов в клетке после проведения успешной трансфекции.

В работе исследуется способность ряда катионных блок-сополимеров конденсировать высокомолекулярную ДНК в растворе для создания генных векторов. Было рассмотрено поведение нескольких систем, содержащих ДНК полимеры различного строения и состава в растворах с различной концентрацией поддерживающего электролита NaCl (0.005 М и 0.15 М). Часть использованных в работе полимеров имеет антраценовую метку для контроля поведения систем с помощью измерения их люминесценции. В исследовании использованы методы ультрафиолетовой спектрофотометрии и низкоградиентной вискозиметрии. Концентрацию и коэффициент молярной экстинкции высокомолекулярной тимусной ДНК определяли по методу Спирина [3].

1. Benjamin D. Hornstein 2 Cinnamon L. Hardee, Lirio Milenka Ar evalo-Soliz and Lynn Zechiedrich. Advances in non-viral DNA vectors for gene therapy. Genes, page 3, February 2017.

2. Corey J Bishop Joel C Sunshine and Jordan J Green. Advances in polymeric and inorganic vectors for nonviral nucleic acid delivery. PubMed Central, pages 1–49, April 2014.

3. Спирина А. С. Спектрофотометрическое определение суммарного количества нуклеиновых кислот. Биохимия, 1958, № 5, с. 656—662.

## Везикулы растительного происхождения как система доставки противоопухолевых препаратов в клетки человека

Л. А. Гараева<sup>1,2,3</sup>, Н. А. Верлов<sup>1,2</sup>, В. С. Бурдаков<sup>1,2</sup>, Е. Ю. Варфоломеева<sup>1,2</sup>,  
С. Б. Ланда<sup>1</sup>, А. В. Волницкий<sup>1,2</sup>, В. В. Егоров<sup>1,2</sup>, А. Л. Коневега<sup>1,2,3</sup>, Т. А. Штам<sup>1,2,4</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> НМИЦ онкологии им. Н. Н. Петрова, Санкт-Петербург, Россия

Экзосомами называют секретлируемые клетками экстраклеточные везикулы (ЭВ) относительно небольшого размера (30-100 нм), окруженные липидным бислоем и способные переносить нуклеиновые кислоты и белки. Считается, что эти микрочастицы могут быть вовлечены в межклеточную коммуникацию [1]. ЭВ обнаружены не только в различных биологических жидкостях человека, но и в кондиционированных средах культивируемых клеточных линий. На сегодняшний день, в научной литературе активно рассматривается возможность создания систем доставки терапевтических молекул в клетки человека на основе экзосом. Схожие с экзосомами наночастицы растительного происхождения (СЭНЧ) обладают свойствами биodeградации и биосовместимости, что делает потенциально возможным их использование в прероральном механизме доставки терапевтических молекул [2].

Целью данного исследования стало изучение возможности «нагрузки» растительных везикул экзогенными РНК и белками для создания природных переносчиков противоопухолевых биомолекул к клеткам желудочнокишечного тракта (ЖКТ). В ходе работы были поставлены задачи оптимизации экстракции и очистки СЭНЧ, а также задача апробации доставки РНК и белков при помощи растительных везикул к клеткам ЖКТ.

В данном исследовании, СЭНЧ были выделены из свежесжатого сока грейпфрута при помощи последовательного ультрацентрифугирования, после чего размер и концентрация полученных везикул были оценены при помощи анализа траектории наночастиц и динамического светорассеяния, а также морфология СЭНЧ была охарактеризована с использованием атомно-силовой микроскопии и крио-электронной микроскопии. В работе была изучена возможность загрузки экзогенными молекулами везикул растительного происхождения при помощи обработки ультразвуком. Так как возможность трансфекции растительных везикул на данный момент не изучена, были использованы неспецифические флуоресцентно и радиоактивно меченные белки для оптимизации протокола. В данной работе была показана высокая эффективность доставки экзогенных молекул растительными везикулами к опухолевым клеткам ЖКТ методом проточной цитометрии, а также при помощи 223 конфокальной микроскопии продемонстрирована их эффективная пенетрация клетками *in vitro*.

Таким образом, в данном исследовании впервые была выявлена возможность «нагрузки» растительных везикул экзогенными РНК и белками. А также впервые была показана возможность интернализации модифицированных везикул растительного происхождения в реципиентные клетки *in vitro*. Результаты убедительно демонстрируют эффективность доставки экзогенного материала при помощи растительных везикул в эпителиальные клетки ЖКТ *in vitro*.

*Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №19-74-2014.*

1. С. Н. Тамкович, О. С. Тутанов, П. П. Лактионов. Экзосомы: механизмы возникновения, состав, транспорт, биологическая активность, использование в диагностике. Биологические мембраны, 2016, том 33, № 3, с. 163–175.

2. Teng Y, Ren Y, Sayed M, et al. (2018) Plant-derived exosomal microRNAs shape the gut microbiota. *Cell Host Microbe* 24(5), 637-52.

## Оценка терапевтического эффекта антисмысловых РНК-олигонуклеотидов в культуре фибробластов, полученных от пациента со спинальной мышечной атрофией

Н. В. Крылова<sup>1,2</sup>, М. А. Маретина<sup>1</sup>, А. В. Ильина<sup>1,2</sup>, А. А. Егорова<sup>1</sup>, А. В. Киселев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Научно-исследовательский институт акушерства, гинекологии и репродуктологии им. Д. О. Отта, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Спинальная мышечная атрофия (СМА) – аутосомно-рецессивное нервномышечное заболевание, характеризующееся дегенерацией мотонейронов передних рогов спинного мозга, что приводит к прогрессирующему параличу и мышечной атрофии. Частота встречаемости данного заболевания составляет 1 случай на 6000-10000 новорожденных, а гетерозиготным носителем является каждый 40-50 человек.

Причиной развития СМА являются гомозиготные мутации, вовлекающие ген SMN1 (survival of motor neuron) в локусе 5q13 [1]. Ген SMN2 представляет собой инвертированную дупликацию SMN1, отличающуюся от последней синонимичными заменами пяти нуклеотидов. Оба гена кодируют белок SMN, однако функционирующий белок синтезируется в основном с транскрипта гена SMN1, тогда как точечная мутация С→Т в энхансере сплайсинга в SMN2 приводит к нарушению сплайсинга пре-мРНК и исключению 7 экзона из большинства транскриптов, что приводит к синтезу неполноразмерного белка, подверженного деградации [2].

На настоящий момент большой интерес вызывает поиск терапевтических агентов, которые могут увеличить количество функционального белка SMN путем активации экспрессии или коррекции сплайсинга гена SMN2. Нами были разработаны антисмысловые РНК-олигонуклеотиды, комплементарные негативным элементам сплайсинга пре-мРНК гена SMN2.

Целью работы является выявление терапевтического эффекта антисмысловых РНК-нуклеотидов и поиск наиболее эффективных их концентраций и сочетаний.

В качестве материала для исследования были выбраны культуры фибробластов человека, полученные от пациентов со СМА и здоровых индивидов. Антисмысловые РНК-олигонуклеотиды были дополнительно модифицированы метильной и фосфотиоатной группировками для повышения стабильности.

С целью оценки уровня полноразмерных транскриптов использовали методики полуколичественной ПЦР с обратной транскрипцией и количественной флуоресцентной ПЦР. Количество белка оценивали на флуоресцентном микроскопе после мечения белка SMN с помощью антител.

В результате проделанной работы было выявлено, что количество полноразмерных мРНК гена SMN2 и «gems» - особых структур, в составе которых располагается белок, значительно выросло при добавлении 227 антисмысловых РНК-олигонуклеотидов к культуре фибробластов, полученных от пациентов со СМА. Также были выявлены концентрации и сочетания олигонуклеотидов, которые обладали наибольшим терапевтическим эффектом по сравнению с другими.

1. Lefebvre, S., Burglen, L., Reboullet, S., Clermont, O., Burlet, P., Viollet, L., Benichou, B., Cruaud, C., Millasseau, P., Zeviani, M. et al. Identification and characterization of a spinal muscular atrophy-determining gene // Cell. 1995. Vol. 80. P. 155-165.

2. Monani, U. R., Lorson, C. L., Parsons, D. W., Prior, T. W., Androphy, E. J., Burghes, A. H. M., & McPherson, J. D. A single nucleotide difference that alters splicing patterns distinguishes the SMA gene SMN1 from the copy gene SMN2 // Human Molecular Genetics. 1999. Vol. 8. N 7. P. 1177- 1183.

## Поиск белковых маркеров глиобластомы в плазме крови человека

**Ф. Ю. Кабаченко<sup>1</sup>, Н. В. Белякова<sup>2</sup>, Н. Л. Ронжина<sup>2</sup>, О. К. Легина<sup>2</sup>, С. Н. Нарыжный<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Молекулярная характеристика злокачественных опухолей была и остается актуальной областью в изучении рака. Протеомные исследования позволяют пролить свет на механизмы, приводящие к образованию рака, выявить мишени для терапии, дать возможность для поиска специфических биомаркеров и выйти на качественно новый уровень в диагностике и лечении данного заболевания. В продолжение нашей работы по поиску онкомаркеров глиобластомы, опухоли головного мозга, мы провели анализ плазмы крови человека. В рамках исследования был проведен сравнительный анализ белковых профилей плазмы крови, полученной от здоровых доноров и людей, имеющих соответствующее заболевание. Было проведено разделение белков двумерным гель-электрофорезом (2DE). Гели были окрашены и сканированы, а полученные изображения белковых профилей проанализированы в сравнительном режиме с помощью программы Progenesis SameSpots. Белки были идентифицированы с помощью сравнительного анализа полученных профилей белков плазмы с профилем, размещенном в базе данных SWISS2DPAGE. В результате анализа была получена статистически достоверная информация о представленности протеоформ наиболее мажорных плазменных белков. Наиболее выраженное различие было выявлено для протеоформ изоформы  $\alpha 2$  гаптоглобина. В контрольной плазме их концентрация была во много раз меньше, чем в плазме у пациентов с диагнозом глиобластома. Важно отметить, что эти данные полностью согласуются с ранее опубликованными литературными данными и указывают на перспективность поиска высокоспецифичных для глиобластомы протеоформ среди протеоформ гаптоглобина.

1. Naryzhny S.N, Zgoda V.G, Maynskova M.A, Novikova S.E, Ronzhina N.L, Vakhrushev I.V, Khryapova E.V, Lisitsa A.V, Tikhonova O.V, Ponomarenko E.A, Archakov A.I. Combination of virtual and experimental 2DE together with ESI LC-MS/MS gives a clearer view about proteomes of human cells and plasma, Electrophoresis. 2016. N.37. P.302-309.

2. Naryzhny S.N, Maynskova M.A, Zgoda V.G, Ronzhina N.L, Novikova S.E, Belyakova N.V, Kleyst O.A, Legina O.K, Pantina R.A, Filatov M.V. Proteomic profiling of high-grade glioblastoma using virtual-experimental 2DE, J Proteomics Bioinform. 2016. N.9. P.158–165.

3. Петренко Е.С., Копылов Л.Т., Клейст О.Л., Легина О.К., Белякова Н.В., Пантина Р.Л., Нарыжный С.Н. В поиске специфических маркеров глиобластомы: анализ протеоформ глиобластомных клеток. Цитология. 2018. N. 60 (7). С.519–523

4. Kumar D.M, Thota B, Shinde S.V, Prasanna K.V, Hegde A.S, Arivazhagan A, Chandramouli B.A, Santosh V, Somasundaram K. Proteomic identification of haptoglobin  $\alpha 2$  as a glioblastoma serum biomarker: implications in cancer cell migration and tumor growth. J Proteome Res. 2010. N.9(11). P.5557-67.

## Ризобиофаг бактерий *Sinorhizobium meliloti*, выделенный в Переднеазиатском центре разнообразия люцерны

А. П. Козлова, М. Е. Черкасова, В. С. Мунтян, А. М. Афонин, М. Л. Румянцева

Всероссийский научно-исследовательский институт сельскохозяйственной микробиологии,  
Пушкин, Санкт-Петербург, Россия

Ризобиофаги – это бактериофаги, заражающие клубеньковые бактерии, в том числе бактерии-микросимбионты люцерны вида *Sinorhizobium meliloti*. При этом ризобиофаги участвуют в контроле численности популяций ризобий в почве и могут влиять на процесс азотфиксации [1].

В данной работе методом двуслойного агара по Адамсу [2] были выделены литические ризобиофаги из почв, отобранных в очаге разнообразия бобовых растений, расположенном на Кавказе [3]. Ризобиофаги выявляли по наличию зон лизиса (бляшек) на бактериальном газоне «штамма ловушки». В качестве «штамма-ловушки» (trapstrain) использовали *S. meliloti* L5-30, в геноме которого отсутствуют профаги. Нуклеиновые кислоты ризобиофагов выделяли с использованием набора GeneJET Viral DNA and RNA Purification Kit (Thermo Fisher Scientific, США). Концентрацию нуклеиновых кислот определяли спектрофотометрически с использованием Biophotometer (Eppendorf AG, Германия).

Выявлено четыре литических ризобиофага, специфичных к *S. meliloti* L5-30, контрастно различающиеся по морфотипу фаговых бляшек. Установлено, что выделенные бактериофаги являлись ДНК-содержащими вирусами. ДНК ризобиофагов секвенировали (MiSeq, Illumina). Сборку геномов проводили с использованием программы SPAdes. В результате была получена полногеномная последовательность ризобиофага, обозначенного как Smel-1. Smel-1 имел геном размером 61 т.п.н. и содержал 94 ОРС.

Функции генов, выявленных в геноме Smel-1 были проанализированы при помощи онлайн ресурсов BLASTn, BLASTp и I-TASSER. Показано, что 55% генома Smel-1 имело 96,2% идентичности с геномом умеренного фага 16-3 (NCBI RefSeq: NC\_011103.1), относящегося к семейству Siphoviridae. Анализ всех ОРС показал, что 3,2% и 2,1% ОРС были гомологичны вирусным генам, кодирующим белки капсида и хвоста фага 16-3, соответственно; 34% ОРС были уникальны для Smel-1, 42,5% имели гомологию с генами, кодирующими гипотетические белки у бактерий вида *S. meliloti*, 18,1% - с бактериальными генами, кодирующими ферменты функциональных COG- групп: вовлеченные в процессы хранения и обработки информации, метаболические процессы, а также детерминирующие синтез репрессоров и белков, разрушающих клеточные стенки.

Таким образом, в очаге разнообразия *S. meliloti* выявлен ДНК-содержащий ризобиофаг, представляющий собой рекомбинантную форму фага представителя семейства Siphoviridae. 230

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 17-16-01095, кроме отбора образцов почв, выполненного при финансовой поддержке РФФИ 18-04- 01278а.

1. Msimbira L. A., Jaiswal S. K., Dakora F. D. Identification and characterization of phages parasitic on bradyrhizobia nodulating groundnut (*Arachis hypogaea* L.) in South Africa. *Applied Soil Ecology*, Vol. 108, 2016. P 334-340

2. Clokie M. R. J., Kropinski A. M., Bacteriophages. *Methods and Protocols*, vol. 1: Isolation, Characterization, and Interactions, 2009. 307 p

3. Muntyan V. S., Wackerow-Kouzova N. D., Prokhorova V. A., Kozlova A. P., Uspenskaya M. V. BACTERIOPHAGES OF SINORHIZOBIUM MELILOTI NATIVE TO ALFALFA ORIGIN OF DIVERSITY AT THE CAUCASUS. 19th International Multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM 2019, 2019.

## Влияние протонов на морфофункциональное состояние головного мозга крыс

И. А. Колесникова<sup>1,2</sup>, Н. Н. Буденная<sup>1,2</sup>, Ю. С. Северюхин<sup>1,2</sup>, К. Н. Ляхова<sup>1</sup>, Д. М. Утина<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

<sup>2</sup> Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

Анализ и прогнозирование постлучевых поражений ЦНС одна из задач радиационной биологии. Действие ионизирующего излучения (ИИ) на центральную нервную систему (ЦНС) вызывает комплекс сложных биохимических и морфофизиологических реакций. Изменения после облучения проявляются в выраженных нарушениях пространственной ориентации, угнетении когнитивных функций [2]. В связи с чем особый интерес представляют структур старейшей коры головного мозга гиппокамп и мозжечок. Целью проведенного эксперимента стало исследование изменений в поведении и морфологических изменений в нейронах гиппокампа и мозжечка крыс после облучения протонами. Эксперимент проведен на самцах крыс линии Sprague Dawley, возраста 6,5-7,5 недель. Животные были подвергнуты облучению протонами в кранио-каудальном направлении в дозе 1 Гр с энергией 171 МэВ на выведенном протонном пучке Фазотрона ОИЯИ (г. Дубна). Изучение поведенческих реакций выполнено на установке «Открытое поле» (ОП) (ООО «НПК Открытая наука») на 1, 7, 14, 30 и 90 суток [1]. Каждое животное тестировалось 6 минут. Время наблюдения делили на два периода: с 1 по 3 и с 4 по 6 минуты. Головной мозг выделяли на 30 и 90 суток и обрабатывали по стандартной гистологической методике (окраска крезилвиолетом по методу Ниссля) [3]. По результатам ОП после облучения протонами у облученных животных по отношению к группе контроля выявлены статистически значимые различия: на 1 сутки показатель ориентировочно-исследовательской реакции (ОИР) был меньше в оба периода, показатель эмоционального статуса (ЭС) был понижен с 1-3 минуты в 1,5 раза; на 7 суток показатель ОИР был ниже с 1-3 минуты; на 14 суток ЭС был повышен с 4-6 минуты в 1,5 раза; на 30 суток был повышен показатель ОИР в 1,5 раза; на 90 суток был повышен показатель ОИР в 2 раза. В работе выявлена динамика развития структурных изменений нейронов после облучения протонами. Морфологическое исследование полей CA1, CA2, CA3 полей гиппокампа показало статистические различия соотношения нормохромных нейронов к числу нейронов с нарушениями разных типов как на 30, так и на 90 суток. При подсчете показателя разреженности клеток Пуркинью мозжечка статистически значимым было снижение показателя у облученных животных на 30 суток. По результатам полученных данных видно, что изменения в поведенческих реакциях облученных животных сопровождались нарушениями в морфологии нейронов, что подтверждает гипотезы об опасности космического излучения для мозга.

1. Буреш Я., Бурешова О., Хьюстон Дж.П. Методики и основные эксперименты по изучению мозга и поведения. М.: Наука, 1992. С. 159–245.

2. Исследованиям V. VII съезд по радиационным исследованиям (радиобиология, радиоэкология, радиационная безопасность) москва, 21-24 октября 2014 года //Москва. – 2014. – Т. 21. – С. 11.

3. Меркулов Г.А. Курс патологистологической техники / Г.А. Меркулов. Л.: Медгиз, 1961. С. 162–165.

## Восстановление активности глюкоцереброзидазы с использованием фармакологического шаперона в макрофагах пациентов с болезнью Гоше и болезнью Паркинсона

А. Э. Копытова<sup>1</sup>, М. А. Николаев<sup>1,2</sup>, Д. А. Богданова<sup>1</sup>, К. А. Сенкевич<sup>1,2,3</sup>, Г. В. Байдакова<sup>4</sup>,  
О. И. Большакова<sup>1</sup>, С. В. Саранцева<sup>1</sup>, И. В. Милохина<sup>1,2,3</sup>, Е. Ю. Захарова<sup>4</sup>,  
С. Н. Пчелина<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> ПСПбГМУ им И. П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> МГНЦ РАМН, Москва, Россия

Болезнь Гоше (БГ) вызвана мутациями в гене GBA, кодирующем лизосомный фермент глюкоцереброзидазу (GCase). БГ - аутосомно-рецессивное заболевание, относящееся к классу лизосомных болезней накопления [1]. Мутации в гене GBA, в том числе и в гетерозиготном состоянии, являются высоким фактором риска болезни Паркинсона (БП). Фармакологические шапероны потенциально могут увеличивать активность GCase и, соответственно, могут быть эффективны в лечении БГ и БП, ассоциированной с мутациями в гене GBA (GBA-БП). Одной из таких молекул является Амброксол (ABX) [2].

Целью данного исследования была оценка эффективности восстановления активности GCase в макрофагах пациентов с БГ и GBA-БП при использовании фармакологического шаперона ABX.

У пациентов с БГ (N=8), GBA-БП (N=6) и лиц контрольной группы (N=6) была собрана мононуклеарная фракция из периферической крови с помощью градиента Фиколла. Для дальнейшей дифференцировки в макрофаги культивировали клетки в среде RPMI (Gibco, USA), содержащей: 10% FBS (Gibco, USA), 1% стрептомицин-пенициллин (Gibco, USA), 10 нг/мл M-CSF (Sigma-Aldrich, USA). На 4-ый день культивирования добавляли 50 мкмоль ABX (Sigma-Aldrich, USA). Ферментативную активность GCase и концентрацию HexSph оценивали методом тандемного массспектрометрического анализа в сухих пятнах макрофагов. Транслокацию GCase (Alexa Fluor 488) в лизосомы (маркер LAMP2 (Cy3)) оценивали в макрофагах пациентов с помощью лазерного конфокального микроскопа Leica TCS-SP5 (объектив х63) (Leica, Germany).

В нашем исследовании показано увеличение активности GCase в макрофагах пациентов с БГ (2,09 (0,60-5,04)) и GBA-БП (56,80 (29,35–115,14)) при добавлении ABX по сравнению с клетками без ABX у пациентов с БГ 0,62 (0,16-1,82) и GBA-БП (19,52 (8,30-27,67)) ( $p<0,001$  и  $p<0,001$  соответственно.) И снижение концентрации HexSph в макрофагах пациентов с БГ (22,74 (15,38-165,36)) и GBA-БП (31,68 (19,73 – 37,92)) при добавлении ABX по сравнению с клетками без ABX у пациентов с БГ (60,12 (39,92-219,97)) и GBA-БП (48,26 (32,15 – 86,66)) ( $p<0,001$  и  $p=0,015$ , соответственно). В макрофагах пациентов с БГ наблюдалось увеличение колокализации GCase и LAMP2. ABX повышает активности GCase и снижает концентрацию лизосфинголипидов в макрофагах пациентов с БГ и GBA-БП. Необходимо дополнительно исследовать действие ABX в качестве потенциального препарата для лечения неврологических форм БГ и GBA-БП. Культура макрофагов подходит для скрининга новых потенциальных фармакологических шаперонов GCase.

*Исследование поддержано грантом РНФ № 17-75-20159.*

1. Ferreira C, Gahl W. Lysosomal storage diseases. TranslSci Rare Dis. 2017;2(1-2):1-71.

2. Aflaki E, Borger D, Moaven N, et al. A New Glucocerebrosidase Chaperone Reduces  $\alpha$ Synuclein and Glycolipid Levels in iPSC-Derived Dopaminergic Neurons from Patients with Gaucher Disease and Parkinsonism. J Neurosci. 2016;36(28):7441-7452.

## Уровень альфа-синуклеина экзосом плазмы крови при синуклеинопатиях

Д. Г. Кулабухова<sup>1,2</sup>, М. А. Николаев<sup>1,2</sup>, К. А. Сенкевич<sup>1,2</sup>, А. И. Безрукова<sup>1</sup>, Н. А. Верлов<sup>1</sup>,  
Е. Ю. Варфоломеева<sup>1</sup>, Т. А. Штам<sup>1</sup>, Т. С. Усенко<sup>1,2</sup>, А. К. Емельянов<sup>1,2</sup>, А. Л. Шварцман<sup>1</sup>,  
С. Н. Пчелина<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

**Введение.** Накопление и агрегация белка альфа-синуклеина в головном мозге лежит в основе патогенеза группы заболеваний, называемых синуклеинопатии, к которым относится болезнь Паркинсона (БП), деменция с тельцами Леви (ДТЛ) и мультисистемная атрофия (МСА). Молекулярные механизмы синуклеинопатий остаются неизвестным. Также остается неясным механизм распространения альфа-синуклеина от клетки к клетке. Последние данные указывают на возможность распространения агрегатов белка альфасинуклеина от клетки к клетке с помощью небольших экстраклеточных везикул (40-100 нм), экзосом [1]. Показано, что экзосомы спинномозговой жидкости (СМЖ), полученные от пациентов с БП, содержат патогенные формы альфасинуклеина, которые могут инициировать олигомеризацию альфа-синуклеина в клетках-реципиентах. Обсуждается, что уровень альфа-синуклеина экзосом плазмы крови и СМЖ может быть рассмотрен в качестве потенциального маркера БП [2].

**Целью** данного исследования являлась оценка уровня альфа-синуклеина экзосом плазмы крови пациентов с БП, БП с деменцией (БПД), ДТЛ, МСА и в контрольной группе.

**Материалы и методы.** В исследование вошло 18 пациентов с БП, 15 пациентов с БПД, 14 пациентов с ДТЛ, 11 пациентов с МСА и 16 индивидуумов без неврологических заболеваний. Экзосомы плазмы периферической крови от всех пациентов были выделены набором Exo-Prep (HansaBioMed, Эстония). Размеры и концентрация экзосом были определены методом анализа траектории наночастиц (NTA) с использованием анализатора NTA NanoSight®LM10 (Malvern Instruments). Количественный анализ экзосомального поверхностного маркера CD9 проведен с использованием набора Exo-FACS (Lonza, Эстония) методом проточной цитометрии на приборе CytoFlex (Beckman Coulter, США). Лизис экзосом периферической крови осуществлялся с использованием набора Total Protein Extraction Kit (Chemicon (Millipore), США). Уровень белка альфа-синуклеина в лизатах экзосом оценивался методом ИФА с использованием набора SensoLyte Anti-alphaSynuclein Quantitative ELISA Kit (Human) (AnaSpec, США), который нормировался на общий белок, оцененный с использованием набора Pierce BCA Protein Assay kit (Thermo Scientific, США).

**Результаты.** Уровень белка альфа-синуклеина в экзосомах плазмы крови в группе пациентов с БП составил  $26,5 \pm 3,6$  пг/мкг, в группе пациентов с БПД –  $28,6 \pm 4,0$  пг/мкг, в группе пациентов ДТЛ –  $35,8 \pm 6,9$  пг/мкг, в группе пациентов с МСА –  $29,8 \pm 3,4$  пг/мкг и в контроле –  $27,5 \pm 4,1$  пг/мкг. Статистически значимых различий в уровне белка альфа-синуклеина в лизатах экзосом плазмы крови между группами выявлено не было ( $p > 0,05$ ).

**Вывод.** Уровень альфа-синуклеина экзосом плазмы крови не может являться биомаркером развития синуклеинопатий и быть использованным для их дифференциальной диагностики.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-315-90059.*

1. Delenclos et al., 2017 Delenclos M., Trendafilova T., Mahesh D. et al. Investigation of Endocytic Pathways for the Internalization of Exosome-Associated Oligomeric Alpha-Synuclein. Front. Neurosci. 2017. - V11, P.172.

2. Stüendl A., Kunadt M., Kruse N. et al. Induction of  $\alpha$ -synuclein aggregate formation by CSF exosomes from patients with Parkinson's disease and dementia with Lewy bodies. *Brain*. 2016. - V.139, P.481-494.

## Изучение роли факторов сборки и ремоделирования хроматина CHD1 и ISWI в регуляции активности генов X-хромосомы у самцов *Drosophila melanogaster*

Я. А. Кучинская, Е. С. Боровых, М. А. Некрасова, А. Ю. Конев

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Для изучения тонких механизмов эпигенетической регуляции экспрессии генов у *Drosophila melanogaster* успешно используется модель дозовой компенсации, которая включает в себя как генетические, так и эпигенетические факторы регуляции. Сам процесс дозовой компенсации (ДК) является фундаментальным и подразумевает под собой обеспечение равного уровня экспрессии X-хромосомных генов у обоих полов. В случае дрозофилы данное равенство достигается за счет увеличения экспрессии генов X-хромосомы самцов примерно в два раза, что подразумевает сбалансированную работу как компонентов активизирующих транскрипцию, так и подавляющих ее агентов. Опосредуется этот процесс работой комплекса дозовой компенсации (MSL: male-specific lethal), который кроме белков MSL1-MSL3, MOF и MLE включает в себя две цепи некодирующей РНК (roX1 и roX2) [1].

Наша работа посвящена изучению роли консервативных АТФ-зависимых хроматин-ремоделирующих факторов в процессе дозовой компенсации у дрозофилы. Наибольший интерес для нас представляет белок CHD1. Как было показано, мутации кодирующего его гена *Chd1* ведут к сильной деформации и деконденсации X-хромосомы самцов [2]. Нами было обнаружено, что у особей дикого типа данный фактор показывает повышенное привлечение к сайтам связывания комплекса MSL на X-хромосоме. Необходимым условием для такого специфического привлечения CHD1 у самцов является нормально функционирующий комплекс MSL. У нуль-мутантных по гену *Chd1* самцов весь соответствующий белок материнского происхождения связывается исключительно с X-хромосомой [3].

Также нами изучается близкий по строению и функциям к CHD1 фактор ISWI, поскольку наблюдаемая у мутантов по гену *Iswi* картина изменений X-хромосомы самцов схожа с таковой у мутантов *Chd1*. Полученные нами результаты иммуноокрашивания политеменных хромосом антителами к ISWI показали отсутствие специфического привлечения этого белка у самцов дикого типа к X-хромосоме – в их случае нет ни усиленного привлечения по сравнению с аутосомами, ни дополнительных сайтов связывания. Эти данные могут свидетельствовать о существенном различии роли этих факторов в процессе ДК, но требуют дальнейшего тщательного изучения.

1. Conrad, T. and Akhtar, A. Dosage compensation in *Drosophila melanogaster*: epigenetic finetuning of chromosome-wide transcription // Nat Rev Genet, – 2012. – V. 13. – No. (2).– P. 123-134. 238

2. Конев, А.Ю., Тютюнник, А.А., and Барановская, И.Л. Влияние мутации гена *Chd1*, кодирующего фактор сборки и ремоделирования хроматина, на организацию политеменных хромосом дрозофилы. // Цитология, – 2016. – V. 58. – No. (4).– P. 281-4. 3. Tiutiunnik A., Baranovskaya I., Kuchinskaya Y., Gnennaya Y., Shalaev A., Konev A. The role of the chromatin remodeling factor CHD1 in the global organization of *Drosophila* chromosomes. // Biopolymers & Cell, – 2019 – V35 – N. 3, – P. 174–175.

## Уровень ДНК-метилтрансферазы (DNMT1) в CD45+ клетках при болезни Паркинсона

А. О. Лавринова<sup>1</sup>, И. В. Милухина<sup>1,3</sup>, Е. М. Литусова<sup>1</sup>, П. А. Гагарина<sup>1</sup>, О. А. Беркович<sup>2</sup>,  
С. Н. Пчелина<sup>1,2,3</sup>, А. К. Емельянов<sup>1,2,4</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

<sup>3</sup> Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия

**Введение.** Болезнь Паркинсона (БП) является нейродегенеративным заболеванием, ассоциированным с гибелью дофаминергических нейронов черной субстанции головного мозга, обусловленной агрегацией в них белка альфа-синуклеина. Было показано, что экспрессия гена альфа-синуклеина (SNCA) может регулироваться за счет изменения паттерна метилирования интрона 1 гена SNCA [1], поддержание которого в клетке происходит с участием ДНК-метилтрансферазы 1-го типа (DNMT1). Ранее было выявлено снижение уровня данного фермента на 50 % в клетках мозга пациентов с БП по сравнению с контролем [2]. При этом оценка уровня данного фермента в клетках крови пациентов с БП ранее не проводилась. В связи с этим целью настоящего исследования явилась оценка уровня белка DNMT1 в CD45+ клетках периферической крови у пациентов с БП и контроля.

**Материалы и методы.** В исследование было включено 43 пациента (средний возраст 66,24±7,05 лет) с БП, не принимающих Л-ДОФА-содержащие препараты и 47 индивидуумов (средний возраст 60,09±7,21 лет) контрольной группы без неврологических заболеваний. CD45+ клетки были выделены из периферической крови в градиенте плотности раствора фиколла (Биолот, Россия) с последующей магнитной сепарацией (ручной сепаратор MACS (Miltenyi Biotec, США), колоноки miniMACS типа MS (Miltenyi Biotec, США)). Лизаты CD45+ клеток были получены с использованием коммерческого набора TotalProteinExtractionKit (Chemicon (Millipore), США). Измерение уровня DNMT1 в указанных группах проводилось методом ИФА (DNMT1 Assay Kit (Epigentek, США)). Статистические расчеты были проведены в программе SPSS 21.0.

**Результаты.** Впервые выявлено снижение уровня белка DNMT1 (нг/мкг белка) в группе пациентов с БП при сравнении ее с контролем (96,91 (255,92- 17,3) и 197,1 (562,05-41,12), соответственно) (p<0.001).

**Заключение.** Полученные данные позволяют предположить, что уровень DNMT1 в CD45+ клетках периферической крови может являться потенциальным маркером развития БП.

1. Jowaed A., Schmitt I., Kaut O., Wullner U. Methylation regulates alpha-synuclein expression and is decreased in Parkinson's disease patients' brains // The Journal of Neuroscience. - 2010. - 30 (18). - P. 6355-6359.

2. Desplats P., Spencer B., Coffee E., Patel P., Michael S., Patrick C., et al. Alpha-synuclein sequesters Dnmt1 from the nucleus: a novel mechanism for epigenetic alterations in Lewy body diseases // The Journal of Biological Chemistry. - 2011. - 286 (11). - P. 9031–9037.

## Изменение экспрессии гена *swiss cheese* приводит к гибели глиальных клеток у *Drosophila melanogaster*

Е. В. Рябова<sup>1</sup>, Н. В. Сурина<sup>1,2</sup>, П. А. Мелентьев<sup>1</sup>, Д. Р. Жмуйдина<sup>1,2</sup>, С. В. Саранцева<sup>1</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

В последнее время интерес к глиальным клеткам значительно возрос из-за их участия не только в опорной и трофической функциях, но и в регуляции важных процессов развития и функционирования в нервной системе. Дисфункция глии приводит к развитию различных нейродегенеративных заболеваний. Дисфункция астроцитов и микроглии считается одним из факторов развития болезни Альцгеймера, болезни Паркинсона и таупатий [1].

Мутации в гене NTE (PNPLA6) приводят к сложному синдрому у людей, который включает спастическую параплегию (НСП) типа SPG39, синдром Лоренса-Муна, синдром Гордона Холмса, синдром Гаучера-Нейгауза и синдром Оливера-Макфарлейна. Ортолог NTE у *Drosophila melanogaster* является ген *swiss cheese* (*sws*), мутации в котором вызывают прогрессирующую дегенерацию нейронов у мух. *SWS* и NTE выражены в нейронах и глиальных клетках [4]. Ранее было показано, что потеря *SWS* в псевдокатриджной глии образует многослойное глиальное обертывание в коре ламины [3]. Также подавление его экспрессии в глиальных клетках приводит к повреждению аксонов у *Drosophila melanogaster*. Однако их роль в патогенезе НСП до сих пор оставалась неизвестной.

В ранее опубликованной работе [2] было показано развитие нейродегенерации при подавлении экспрессии *sws* в субпериневральной и *ensheathing* глии, а также изменение морфологии данных типов клеток. В данной работе, с помощью лазерной конфокальной микроскопии нами показано, что при подавлении экспрессии гена *sws* происходит нарушение еще одного типа глиальных клеток – глии кортекса. Также мы проверили нарушение функциональности барьера у насекомого и сделали количественную оценку поверхностной и глии кортекса. Потеря *SWS* в поверхностной глии и глии кортекса приводит к изменению внешней структуры и уменьшению количества клеток. Данные результаты могут указывать на то, что дисфункция некоторых типов глиальных клеток также способствуют развитию патологий, наблюдаемые у людей с мутациями в NTE.

*Работа поддержана грантом РФФИ № 18-34-00982.*

1. Choi SH, Veeraraghavalu K, Lazarov O, Marler S, Ransohoff RM, Ramirez JM, Sisodia SS. Noncell-autonomous effects of presenilin 1 variants on enrichment-mediated hippocampal progenitor cell proliferation and differentiation// *Neuron*. – 2008 – V.59 – P. 568-580.

2. Dutta S., Rieche F., Eckl N., Duch C., Kretzschmar D. Glial expression of Swiss cheese (SWS), the *Drosophila* orthologue of neuropathy target esterase (NTE), is required for neuronal ensheathment and function// *Disease Models & Mechanisms*. – 2016 – V.9 – P. 283-294.

3. Kretzschmar D., Neurogenet J. Swiss cheese et alii, some of the first neurodegenerative mutants isolated in *Drosophila*// – 2009 – V.23 – P.34-41.

4. Muhlig-Versen M., Bettencourt da Cruz, A., Tschape J.A., Moser M., Buttner R., Athenstaedt K., Glynn P. and Kretzschmar D. Loss of Swiss cheese/neuropathy target esterase activity causes disruption of phosphatidylcholine homeostasis and neuronal and glial death in adult *Drosophila*. *J. Neurosci.* 25, 2865-2873.

## Структурно-функциональные изменения обонятельных луковиц в ответ на хроническое интраназальное введение липополисахарида

*К. С. Сергеева*

*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

**Введение.** Обонятельная дисфункция является распространенным и ранним симптомом многих нейродегенеративных заболеваний, в частности болезни Паркинсона (БП) и других синуклеинопатий, предвещающего его прогрессирование до деменции [1]. Обонятельная дисфункция связана с отложением альфа-синуклеина в области обонятельного эпителия и обонятельных луковиц, характеризующихся тельцами Леви и нейритами, вызывающими сложный каскад молекулярных процессов, включая окислительное повреждение, нейровоспаление и цитозольное нарушение клеточных процессов, ведущих к гибели клеток. Вероятно, повреждаются холинергическая, серотонинергическая и норадренергическая системы, поскольку такое повреждение наиболее заметно при заболевании с тяжелой anosmией [2].

**Методы.** Эксперимент проводился на 18 самках белых беспородных мышей массой 25-30г, содержащихся в стандартных условиях со свободным доступом к воде и пище. Перед началом эксперимента в течение месяца проводили хэндлинг животных с последующим интраназальным введением растворов по методу Hanson L.R. [4]. Опытной группе животных (9 мышей) в правую ноздрю в течение 30 дней вводили 10 мкл раствора ЛПС E.Coli (Sigma, USA) в концентрации 1 мг/мл. Контрольной группе (9 мышей) в том же объеме вводили стерильный физиологический раствор. По окончании эксперимента проводили стандартную процедуру кардиальной перфузии с последующим забором материала, из которого получали фронтальные криостатные срезы толщиной 14 мкм на микротоме «Shandon Cryotome». Гистологические препараты окрашивали 1% метиленовым синим и иммуногистохимическим методом для выявления  $\alpha$ -синуклеина (антитела кроличьи поликлональные IgG, Abcam). Гистологические материалы исследовались с помощью микроскопа «Nikon Eclipse E200».

**Результаты.** При хроническом интраназальном одностороннем введении ЛПС обнаруживаются признаки нейровоспаления в обонятельных луковицах при сравнении с введением СФР. В гломерулярном слое обонятельных луковиц мы обнаружили увеличение количества мелких клеток со стороны введения ЛПС, по сравнению с областью введения СФР. Так как нейроны не способны к пролиферации, это явление можно объяснить глиозом, возникающим в ответ на воспаление в области обонятельной выстилки, индуцированное введением ЛПС. Так же признаком хронического нейровоспалительного процесса в мозговой ткани может служить выраженная сосудистая реакция, при которой происходит заметное увеличение диаметра сосудов у животных, которым вводили ЛПС, по сравнению с животными, которым вводили СФР.

На препаратах ОЛ также выявлено усиление экспрессии  $\alpha$ -синуклеина в зоне обонятельного нерва, что может свидетельствовать об аксональном переносе белка из обонятельного эпителия в центральные отделы нервной системы. У животных, которым вводили ЛПС  $\alpha$ -синуклеин обнаруживается в гломерулярном слое, или наружном плексиформном слое, слое митральных клеток, внутреннем плексиформном слое и близлежащей области гранулярного слоя последовательно, что скорее всего говорит об аксональном транспорте  $\alpha$ -синуклеина, чем об усилении его экспрессии в этих слоях.

1. Braak H., Del Tredici K., Rüb U., de Vos R. A. I., Jansen Steur E. N. H., Braak E. Staging of brain pathology related to sporadic Parkinson's disease//Neurobiol Aging.2003 V. 24. P. 197–211

2. Rey N. L., Wesson D. W., Brundin P. The olfactory bulb as the entry site for prion-like propagation in neurodegenerative disease// Neurobiology of Disease. 2018. V. 109B, P. 226-248.

3. Hanson L.R. Intranasal Administration of CNS Therapeutics to Awake Mice//Journal of Visualized Experiments. 2013. №74. P. 2-7.

## **Обнаружение у птиц группы внеклеточных низкоспецифичных металоопептидаз мозга; первоначальная характеристика, сравнение с млекопитающими**

*К. К. Ситдикова, Е. С. Кропотова*

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

Ранее в мозге млекопитающих была выявлена группа внеклеточных низкоспецифичных пептидаз (NEMP) [1]. Вероятной функцией пептидаз NEMP является контролируемый катаболизм пептидных нейромедиаторов (нейромедиаторов). Такая функция необходима для нормальной работы мозга. Очевидно, что у птиц также должна осуществляться аналогичная функция. Представлялось целесообразным обнаружить в мозге птиц и охарактеризовать ферменты, выполняющие эту функцию. Этот вопрос интересен и потому, что эволюция млекопитающих и эволюция птиц, включая их предшественников динозавров, после разделения этих ветвей около 250 миллионов лет тому назад протекали без пересечений. Можно было ожидать, что за этот период в обеих ветвях будут созданы разные системы для контроля нейропептидов. Для выяснения этого вопроса из мозга птицы (курица) были выделены аксонные окончания нейронов (синапсосомы). Присутствие пептидаз на поверхности синапсосом определяли при инкубации реперных пептидов в суспензии тщательно отмытых синапсосом [2]. Продукты деградации реперных пептидов определяли методом тонкослойной хроматографии. Трипептид Ala-Lys-Phe (AKF) в этой системе разрушается до отдельных аминокислот. Такой результат свидетельствует о присутствии на поверхности синапсосом экзопептидаз, способных разрушить также дипептиды (дипептидаз). Однако дипептид карнозин ( $\beta$ Ala-His) не разрушался в присутствии синапсосом. Это означает, что связанные с синапсосомами экзопептидазы-дипептидазы не способны нарушить пептидную связь, образованную с участием бета-аланина. Такой же результат был получен в аналогичном эксперименте с млекопитающими. Этот результат позволил создать набор тест-пептидов, который может быть применен и в настоящем исследовании на птицах. Применение ингибиторов металлопептидаз (1-10 феноантролин, EDTA) показало, что, как и у млекопитающих, все проявившие активность связанные с синапсосомами, являются металоферментами. Исследуемые пептидазы названы VNEMP (Bird Neuron bound Ecto MetalloPeptidase). Для отделения пептидаз VNEMP от синапсосом использована низкая концентрация детергента (0.1%) детергента Тритон X-100. Для разделения пептидаз VNEMP использован электрофорез в полиакриламидном геле при неденатурирующих условиях. Сопоставление полученных результатов с ранее полученными данными для NEMP млекопитающих показало, что совпадающих по подвижности пептидаз нет. Анализ данных, полученных с помощью тест-пептидов показал, что свойства пептидаз в обеих группах также различны. Полученные результаты подтверждают целесообразность дальнейших исследований группы внеклеточных металлопептидаз мозга птиц.

1. Kropotova E.S., Mosevitsky M.I. A group of weakly bound to neurons extracellular metallopeptidases (NEMPs) // *Neurochem. Res.* 2016. V. 41 N 10. P. 2666-2674.

2. Checler F., Vincent J.P., Kitabgi P. Purification and characterization of a novel neurotensin-degrading peptidase from rat brain synaptic membranes. // *J Biol Chem* 1986. V. 261 P.11274–11281.

## Эффект фуллеренола C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> на патогенез болезни Альцгеймера на модели *Drosophila melanogaster*

А. Д. Слободина<sup>1,2</sup>, П. А. Мелентьев<sup>1,2</sup>, О. И. Большакова<sup>1</sup>, С. И. Тимошенко<sup>1</sup>,  
С. В. Саранцева<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Наиболее распространенной формой нейродегенеративных заболеваний в современном обществе является болезнь Альцгеймера (БА). На сегодняшний день отсутствуют окончательные представления об этиологии БА, а также не существует лекарства, способного остановить или замедлить течение этого заболевания [1]. В связи с этим необходим поиск новых классов терапевтически перспективных соединений, которые могут служить основой для создания эффективных лекарственных препаратов. В качестве таких веществ можно рассматривать фуллерены и их производные благодаря трем основным свойствам: эти молекулы обладают антиоксидантной активностью, взаимодействуют с амилоидным пептидом бета (Aβ) и препятствуют его агрегации и служат векторами для доставки лекарств [2,3].

Целью настоящей работы стало определение эффекта фуллеренола C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> на патогенез болезни Альцгеймера на модели *Drosophila melanogaster*. В работе использовалась трансгенная линия *Drosophila melanogaster*, несущая в геноме последовательность, кодирующую пептид Aβ<sub>42</sub>.

Методами атомно-силовой и трансмиссионной электронной микроскопии установлено, что инкубация Aβ<sub>42</sub> с фуллеренолом в течение 24 часов при температуре 37<sup>0</sup>С снижает агрегацию Aβ<sub>42</sub>, т. е. C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> обладает антиамилоидогенной активностью. В работе показано, что все использованные дозы фуллеренола C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> не снижают продолжительность жизни мух. Фуллеренол C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> положительно влияет на уровень геотаксиса, снижает уровень нейродегенерации в мозге и не влияет на показатели обучаемости и среднесрочной памяти *Drosophila melanogaster*. С помощью конфокальной микроскопии было показано, что фуллеренол C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> проходит через ГЭБ *Drosophila melanogaster* и мембраны клеток линии V79.

Таким, образом, фуллеренол C<sub>60</sub>(OH)<sub>30</sub> может служить основой для создания и разработки лекарственных препаратов для лечения такого социально-значимого заболевания как БА.

1. Родин Д.И., Шварцман А.Л., Саранцева С.В. Современные подходы к терапии при болезни Альцгеймера: от амилоида к поиску новых мишеней // Ученые записки СПбГМУ им. Акад. И.П. Павлова. – 2014. – Т. 21. – № 1. – С. 6-10.

2. Бобылёв А.Г., Марсагишвили Л.Г., Шпагина М.Д., Романова В.С., Котельникова Р.А., Подлубная З.А. Действие нитропроизводных фуллерена C<sub>60</sub> на амилоидные фибриллы Aβ<sub>1-42</sub>-пептида мозга и мышечного X-белка // Биофизика. – 2010. – Т. 55. – № 3. – С. 394-399.

3. Bednarikova Z., Huy P.D.Q., Mocanu M.M., Fedunova D., Li M.S., Gazova Z. Fullereneol C<sub>60</sub>(OH)<sub>16</sub> prevents amyloid fibrillization of Aβ<sub>40</sub> - in vitro and in silico approach // The Royal Society of Chemistry. – 2016. – V. 00. – № 1-3. – P. 1–16.

## Особенности транскрипции генов у мутантов CHD1 в слюнных железах дрозофилы

*А. В. Торощина, Ю. А. Ильина, А. Ю. Конев.*

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

В эукариотических клетках генетический материал присутствует в виде нуклеопротеинового комплекса (хроматина), нити ДНК которого накручены на нуклеосомы, состоящие из гистоновых белков. Для реализации генетической информации необходимо освободить необходимые участки ДНК от нуклеосом, а после, восстановить их нуклеосомную последовательность. Удаление и сборка нуклеосом осуществляется гистоновыми шаперонами и АТФ-зависимыми хроматин ремоделирующими факторами. Впервые *in vivo* участие в сборке хроматина АТФ-зависимых факторов было показано для белка CHD1 [1]. CHD1 (хромодоменсодержащая ДНК-связывающая геликаза) – это консервативная SNF2-подобная АТФ-аза. В человеческом геноме расположены 2 гомолога CHD: CHD1 и CHD2, являющиеся онкогенами. Как сверхпродукция белка CHD1, так и гомозиготные делеции гена CHD1 являются причиной некоторых типов онкологии простаты [2], что делает белок CHD1 возможной терапевтической мишенью. В геноме дрозофилы был найден всего один ген CHD1. Отсутствие или дисфункция белка CHD1 провоцирует нарушение сборки хроматина в мужском пронуклеусе и, как следствие - нежизнеспособность эмбрионов дрозофилы. Известно, что CHD1 необходим для включения вариантного гистона H3.3 в репликативно-независимой сборке хроматина [1]. CHD1 принимает участие в регуляции транскрипции, в политенных хромосомах он колокализуется с элонгирующей формой РНК полимеразы II, необходим при работе РНК полимеразы I [3].

Ранее в нашей лаборатории было показано, что сверхпродукция нативной и каталитически неактивной форм белка CHD1 вызывает серьезную деформацию политенных хромосом в слюнных железах дрозофилы. На первом этапе были исследованы гены из пуфированного района 3C: Sgs4, ng2 и Pig1.

В данной работе мы исследовали влияние сверхэкспрессии CHD1 в его нативной, доминант-негативной форме и у нуль-мутанта на транскрипцию генов из районов с нарушенным пуффированием политенных хромосом. В работу включены гены экдизонового ответа Eig71Eb, Eig71Eg и Eig71Ee, расположенные в районе 71E.

1. Konev A. Y., M. Tribus S. Y., Park V., Podhraski C. Y. et al. CHD1 motor protein is required for deposition of histone variant H3.3 into chromatin *in vivo*. *Science*. 2007. V. 317(5841). P. 1087- 1090.

2. Rodrigues L. U., Rider L., Nieto C., Romero L. et al. Coordinate loss of MAP3K7 and CHD1 promotes aggressive prostate cancer. *Cancer Res*. 2015. V. 15, 75(6). P. 1021-34.

3. McDaniel I. E., Lee J. M., Berger M. S., Hanagami C. K., Armstrong J. A. Investigation of CHD1 function in transcription and development of *Drosophila melanogaster*. *Genetics*. 2008. V. 178(1). P. 583-587.

## Изучение кинетики репарации двунитевых разрывов у дрозофилы *in vivo*

В. Ю. Украинцев<sup>1,2</sup>, Ю. А. Ильина<sup>2</sup>, А. Ю. Конев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Для сохранения целостности и нормального функционирования генома важную роль играет способность клетки репарировать полученные повреждения ДНК. Наиболее опасным повреждением ДНК является двунитевой разрыв (ДР), возникающий как при воздействии таких агрессивных внешних факторов как ионизирующее излучение, а также при естественном метаболизме генома. История изучения механизмов репарации многоклеточных организмах насчитывает более 40 лет, известны основные механизмы связанные с непосредственным устранением повреждений на молекуле ДНК. Однако в последние годы внимание ученых сосредоточено на изучении работы репарационных систем в контексте хроматина и определении взаимодействия репарационных систем и ремодуляторов хроматина.

Современное техническое обеспечение дает возможность *in vivo* изучать кинетику репарационных процессов. Целью нашей работы стало определение влияния АТФ-зависимых хроматин-ремоделирующих белков и паралога центрального белка репарационной репарации RAD51 белка RAD51D на продолжительность репарации ДР ДНК в различных органах и тканях на разных стадиях развития высших эукариотических организмов. Современные методы конфокальной микроскопии и использование флуоресцентных белков позволяют бесконтактно изучать различные типы клеток. Использование конфокального микроскопа Leica SP5 на базе инвертированного микроскопа Leica DMI-6000 и его программного обеспечения позволяет создавать объёмные изображения срезов, клеток, разных веществ. Непрерывная визуализация живых тканей обеспечивает возможность наблюдать протекание биологических процессов и *in vivo* изучать процессы репарации ДНК на молекулярном уровне.

На первом этапе сигнализации о возникшем ДР ДНК происходит фосфорилирование гистона H2Av ( $\gamma$ H2Av). Нами была синтезирована линия дрозофилы, геном которой содержит H2Av-RFP во второй хромосоме и MU-2– YFP в третьей. Конструкция H2Av-RFP позволяет детектировать генетический материал в ядрах клеток. Визуализация ДР ДНК была возможна благодаря использованию конструкции, в которой MU-2 соединен с YFP. MU2, ортолог человеческого MDC1, показана его ко-локализация с  $\gamma$ H2Av после облучения [1]. Дизайн эксперимента разрабатывался на основе методик и протоколов, описанных в статьях [2, 3], использующих аналогичный подход к исследованиям репарации.

В контрольном эксперименте с использованием облученных эмбрионов на фоне флуоресценции RFP, связанного с гистоном H2Av были детектированы фокусы репарации, обнаруженные с помощью конструкции MU2 – YFP. В настоящее время проводится работа по обработке полученных данных о времени уменьшения сигнала желтого флуоресцентного белка, свидетельствующего о длительности репарации ДР ДНК для каждого локуса.

1. Dronamraju, R., Mason, J.M. MU2 and HP1a Regulate the Recognition of Double Strand Breaks in *Drosophila melanogaster*// PLoS ONE, 2011, 6(9)

2. Aniek Janssen, Gregory A. Breuer Eva K. Brinkman, et al. A single double-strand break system reveals repair dynamics and mechanisms in heterochromatin and euchromatin // Genes Dev. 2016, 30. doi: 10.1101/gad.283028.116

3. Lerit, D.A., Plevock, K.M., Rusan, N.M. Live Imaging of *Drosophila* Larval Neuroblasts // J. Vis. Exp. (89), e51756, doi:10.3791/51756 (2014).

## Применение методики регистрации РРВ в нейтрофилах периферической крови мышей для оценки воспалительных процессов

*Н. Д. Федорова, Н. А. Верлов, Е. Ю. Варфоломеева, М. В. Филатов*

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

Способность нейтрофилов отвечать на внешние стимулы генерацией радикалов кислорода – явление, известное как реакция респираторного взрыва (РРВ). Эта реакция является неотъемлемой частью воспалительного процесса.

В лаборатории клеточной биологии ОМРБ ПИЯФ ранее был разработан вариант проточноцитометрического метода регистрации РРВ в нейтрофилах периферической крови (без их выделения) с использованием дигидроэтидина в качестве красителя. Данный метод позволяет изучать воспалительные процессы, возникающие при различных заболеваниях [1, 2].

Упомянутая методика была разработана для регистрации РРВ в крови человека, однако получение таких образцов для изучения и моделирования реакции бывает затруднено. Таким образом, встала задача модификации метода для образцов мышинной крови, предоставляющей больше возможностей для исследования.

Одно из основных условий успешного использования метода регистрации РРВ – наличие стандартного распределения нейтрофилов по способности продуцировать активные формы кислорода (АФК), характерного для образцов крови условно здоровых доноров. Соответственно, для уверенного использования разработанной методики для крови мышей, необходимо показать наличие подобного «стандартного распределения».

Кровь для исследования отбирали из глазной вены наркотизированных лабораторных мышей [3] в раствор гепарина в PBS (стандартный фосфатносолевой буфер) с концентрацией гепарина 60 ед/мл (конечная концентрация гепарина в образце 30 ед/мл). Реакция проводилась согласно описанию в статье [4]. Интенсивность флуоресценции образцов измеряли сразу после проведения реакции с помощью стандартного проточного цитофлуориметра (Beckman Coulter), имеющего в качестве источника света аргоновый лазер с длиной волны 488 нм.

В результате были получены гистограммы, указывающие на наличие для мышинной крови стандартного распределения способности нейтрофилов к продуцированию АФК, подобного таковому для крови человека.

Таким образом, с большой долей уверенности можно считать РРВ нейтрофилов крови мыши аналогичной таковой в крови человека. Адаптация метода регистрации реакции респираторного взрыва в нейтрофилах крови для исследования образцов, полученных от мышей, открывает возможности моделирования условий, влияющих на способность нейтрофилов к РРВ, и как следствие, даёт перспективу для более детального изучения данного явления.

1. Filatov M., Varfolomeeva E., Ivanov E. Flow cytofluorometric detection of inflammatory processes by measuring respiratory burst reaction of peripheral blood neutrophils // *Biochem. Mol. Med.* 1995 Vol. 55, N 2. P. 116-121.

2. Е. Ю. Варфоломеева и др. Регистрация воспалительных процессов при различных заболеваниях методом проточной цитофлуориметрии // *Бюллетень экспериментальной биологии и медицины.* 2010. Т. 149, №4. С. 471-475.

3. Parasuraman S., Raveendran R., Kesavan R. Blood sample collection in small laboratory animals // *J. Pharmacol. Pharmacother.* 2010. Vol. 1, № 2. P. 87.

4. Varfolomeeva E.Y. et al. Ceruloplasmin decreases respiratory burst reaction during pregnancy // *Free Radic. Res.* 2016. Vol. 50, № 8. P. 909–919.

## Исследование субстратной специфичности альфа-L-фукозидазы из *Fusarium proliferatum* LE1 методами молекулярного моделирования

А. А. Чеблоков<sup>1,2</sup>, А. А. Кульминская<sup>1,2,3</sup>, Г. Н. Рычков<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия <sup>3</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

Фукоиданы – гетерогенные фукозосодержащие сульфатированные полисахариды, выделяемые из морских водорослей. Известно, что короткие фрагменты фукоиданов и моносахариды фукозы обладают рядом биомедицинских активностей, однако ввиду сложности получения гомогенных препаратов в настоящее время они нашли применение только в косметологии и производстве биологически активных пищевых добавок [1]. Гидролиз фукоиданов ферментативным способом является не только экономически выгодной альтернативой малоэффективным и дорогостоящим методам химической деградации, но и позволяет управлять степенью деполимеризации. Недавно клонировали ген альфа-L-фукозидазы (FFpI) штамма мицелиального гриба *Fusarium proliferatum* и охарактеризовали биохимические свойства, кодируемого им фермента. Мы проверяем возможность внесения модификаций в аминокислотную последовательность альфа-L-фукозидазы (FFpI), приводящих к появлению у фермента эндо-фукоиданазной активности.

Сравнительный анализ доступных структур фукозидаз семейства GH29, эндо-фукоиданаз из семейства GH107 и структурно близких ферментов с эндоактивностью показал, что основное различие пространственных структур связано с конфигурацией петли, соединяющей первую  $\beta$ -нить с первой спиралью каталитического ТИМ-барреля. По гомологии с фукозидазой из *Fusarium graminearum* (код PDB: 4NI3) построили [2, 3] атомарную модель FFpI. Методами молекулярного моделирования [3, 4, 5] установили возможные варианты связывания трифукозидов с различным чередованием  $\alpha(1\rightarrow2)$ -,  $\alpha(1\rightarrow3)$ - и  $\alpha(1\rightarrow4)$ - связей и различными вариантами сульфатирования по 2 и 4 гидроксильным группам остатков фукозы в активном центре FFpI. Наименьшей свободной энергией связывания равной -23,6 ккал/моль обладает трифукозид  $\alpha$ L-Fuc-1,3- $\alpha$ -L-Fuc-1,2- $\alpha$ -L-Fuc. Ключевые аминокислотные остатки, участвующие во взаимодействии с субстратами: H30, E42, W43, H122, H123, H167, W220, D222, F223, K268, E284, R285, D299, W307.

Проведённая работа даёт возможность исследования различных вариантов укорочения петли фукозидазы FFpI, заключённой между остатками в позициях 35 и 105, что, как ожидается, способно привести к появлению у фермента эндо-фукоиданазной активности.

*Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1363 от 25.06.2019 г.)*

1. Fitton J., Stringer D., Karpiniec S. Therapies from fucoidan: An update //Marine drugs. – 2015. – Т. 13. – №. 9. – С. 5920-5946.

2. Waterhouse, A., Bertoni, M., Bienert, S., Studer, G., Tauriello, G., Gumienny, R., Heer, F.T., de Beer, T.A.P., Rempfer, C., Bordoli, L., Lepore, R., Schwede, T. SWISS-MODEL: homology modelling of protein structures and complexes. Nucleic Acids Res. 46(W1), W296-W303 (2018).

3. D.A. Case, R.M. Betz, D.S. Cerutti et al (2016), AMBER 2016, University of California, San Francisco.

4. Abagyan, M. Totrov, D. Kuznetsov. Journal of Computational Chemistry. 1994 Vol. 15 ICM A new method for protein modeling and design. – № 5 – P. 488-506.

5. Woods Group. (2005-2018) GLYCAM Web. Complex Carbohydrate Research Center, University of Georgia, Athens, GA.

## Особенности функциональной биоэлектрической активности нейронных сетей первичных культур гиппокампа в условиях разобщения межastroцитарных контактов

Р. С. Ярков, Т. А. Мищенко, Е. В. Митрошина, М. В. Ведунова

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет  
им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

Астроциты являются самым многочисленным типом клеток в головном мозге, которые не только обеспечивают поддержание метаболического и ионного гомеостаза и выполняют трофические функции, но и принимают активное участие в реализации когнитивных функций, обработке информации в головном мозге, а также развитии ряда патологий, в том числе болезни Альцгеймера [3], бокового амиотрофического склероза [2]. Последние экспериментальные данные свидетельствуют о том, что астроциты формируют функциональный синцитий и могут обмениваться сигнальными молекулами [3]. Ключевую роль в формировании астроцитарных конгломератов играют щелевые межклеточные каналы (gap-контакты), образованные белками коннексинами 30 и 43 (Cx30 и Cx43). В настоящее время свойства локальных астроцитарных контактов и их влияние на функциональную нейросетевую активность не изучены. Целью работы являлось изучение влияния коннексинов 43 на функциональную биоэлектрическую активность нейронных сетей первичных культур гиппокампа.

Материалом для исследований служили первичные культуры клеток гиппокампа, полученные от 18-ти дневных эмбрионов мышей линии C57Bl/6. Культивирование осуществлялось на мультиэлектродных матрицах MEA 60 (Multichannel systems, Германия). На 14 день развития *in vitro* в культуральную среду вносили селективный блокатор коннексина 43 - Gap19 (10 мкМ). Регистрировались следующие параметры спонтанной биоэлектрической нейросетевой активности: количество сетевых пачек, количество спайков в сетевой пачке.

В результате проведенных исследований было показано, что однократное применение блокатора коннексина 43 снижает количество спайков, формирующих сетевую пачку импульсов, спустя 2 часа после аппликации («до аппликации»  $164.91 \pm 18.32$ , «после аппликации»  $27.89 \pm 5.42$ ,  $p=0,01$ , ANOVA). Хроническая аппликация Gap19 (10 мкМ) в течение 10 дней приводит к необратимому угнетению нейросетевой активности. Уже на следующие сутки регистрировалось достоверное снижение количества малых сетевых пачек («интактные»  $155.7 \pm 14.3$ , «Gap19»  $61.2 \pm 14.5$ ,  $p=0,01$ , ANOVA), а также количества спайков их формирующих («интактные» -  $95.7 \pm 18.3$ , «Gap19»  $41.2 \pm 10.5$ ,  $p=0,01$ , ANOVA). На третьи сутки хронического эксперимента сетевой пачечной активности не зарегистрировано.

Таким образом, было показано, что функциональные астроцитарные контакты играют важную роль в функциональном паттерне нейросетевой активности первичных культур гиппокампа. Для развития эффекта блокады коннексинов 43 требуется продолжительное время (два часа и более), поскольку процессы нейрон-глиального взаимодействия связаны с длительными метаболическими реакциями.

*Работа выполнена в рамках государственного задания (проекты 17.3335.2017/4.6 и 6.6379.2017/8.9), а также при поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-1485.2019.4).*

1. Yi Yi C., Koulakoff A., Giaume C. Astroglial Connexins as a Therapeutic Target for Alzheimer's Disease // Current pharmaceutical design. – 2017. – Vol. 23. №. 33. P. 4958-4968.

2. Yamanaka K., Komine O. The multi-dimensional roles of astrocytes in ALS // Neuroscience research. – 2018. – Vol. 126. P. 31-38. 3. Giaume C. et al. Astroglial networks: a step further in neuroglial and gliovascular interactions // Nature Reviews Neuroscience. – 2010. – Vol. 11. №. 2. – P. 87.