



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

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



ЛЕТ

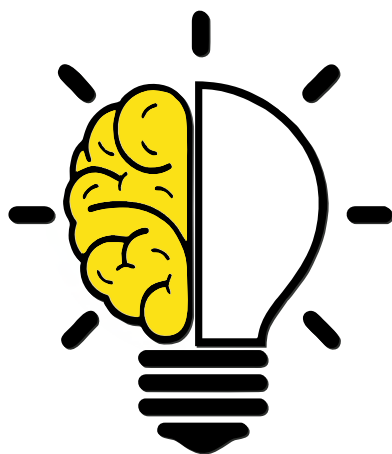
OpenScience

НА ПИКЕ НАУКИ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

VIII Всероссийского молодежного
научного форума

“Open Science 2021”



17–19 ноября 2021 г.
Гатчина

В данном выпуске представлены аннотации докладов VIII Всероссийского молодежного научного форума “Open Science 2021”, 17–19 ноября 2021 г., г. Гатчина.

Проведению форума оказал поддержку



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

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



Сборник подготовили М. В. Суясова, Г.Н.Клюшников, Н.С. Железов

Примечание: материалы представлены в авторской редакции.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2021

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

- М.В. Ковальчук – председатель, НИЦ «Курчатовский институт»
- О.С. Нарайкин – заместитель председателя, НИЦ «Курчатовский институт»
- А.Е. Благоев – заместитель председателя, НИЦ «Курчатовский институт»
- М.В. Суясова – секретарь, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- В.В. Антипов, НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ
- Д.Н. Аристов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- С.А. Артамонов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- С.И. Воробьев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- В.В. Воронин, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- С.В. Григорьев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- Ю.А. Дьякова, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- И.И. Еремин, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- В.Т. Ким, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- А.А. Ковалишин, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- А.А. Коршенинников, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- С.В. Костров, НИЦ «Курчатовский институт» – ИМГ (по согласованию)
- А.И. Курбаков, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- Н.В. Марченков, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- М.А. Матвеев, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- Е.Ю. Москалева, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- С.Н. Нарыжный, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- А.В. Николаенко, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- М.В. Патрушев, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- С.Н. Пчелина, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- В.М. Ретивов, НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА (по согласованию)
- С.В. Саранцева, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- К.А. Сергунова, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- М.Д. Скорохватов, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- О.В. Фомина, НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей» (по согласованию)
- С.Н. Чвалун, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- А.Ю. Черненко, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- Н.М. Чубова, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- Д.Ю. Чувиллин, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)
- К.А. Шабалин, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- А.В. Швецов, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
- А.С. Яненко, НИЦ «Курчатовский институт» – ГосНИИ Генетика (по согласованию)
- Е.Б. Яцишина, НИЦ «Курчатовский институт» (по согласованию)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Н.Ю. Петрова – сопредседатель организационного комитета

В.В. Абрамец – сопредседатель организационного комитета

Р.А. Ниязов – зам. председателя организационного комитета

Е.В. Калоева – секретарь организационного комитета

Н.К. Буш, информационное обеспечение

М.В. Доронин, техническое обеспечение

Н.С. Железов, техническое обеспечение

Р.А. Жеронкина, информационное обеспечение

Г.Н. Ключников, техническое обеспечение

Р.А. Ниязов, техническое обеспечение

Д.С. Новосельцев, техническое обеспечение

К.А. Русяева, техническое обеспечение

А.И. Титов, техническое обеспечение

А.Б. Утюжников, техническое обеспечение

С.В. Халяпин, техническое обеспечение

В.В. Чуликов, техническое обеспечение

С.А. Шека, техническое обеспечение

Н.М. Ярута, техническое обеспечение

Влияние наночастиц серебра на когнитивные функции млекопитающих

Анциферова А.А.^{1,2}, Копяева М.Ю.¹, Кочкин В.Н.¹, Кашкаров П.К.^{1,2,3}

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

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

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

В настоящее время, особенно в связи с пандемией SARS CoV-2, высоко востребованы различные антисептические средства и фармакологические препараты, в том числе на основе наночастиц серебра [1]. Механизм вирулицидного, бактерицидного и фунгицидного (токсического) действия наночастиц серебра до конца не ясен, однако многие исследователи связывают его с генерацией свободных радикалов и активных форм кислорода.

Настоящее исследование посвящено выявлению возможных побочных эффектов при ежедневном пероральном введении стабилизированных наночастиц серебра в количестве 50 мкг/сутки (средний размер 34 нм) в организм лабораторных мышей C57Bl/6 в течение 30, 60, 120 и 180 суток. Контрольные группы мышей получали дистиллированную воду в режиме *ad libitum*.

В конце каждого периода введения поведение и когнитивные способности мышей фиксировали в тестах «открытое поле», «приподнятый крестообразный лабиринт» и «модель условно-рефлекторного замирания». Внутренние органы, в том числе, головной мозг отбирали для исследования биораспределения серебра в его отделах (гиппокампе, мозжечке, коре и остатке) методом нейтронно-активационного анализа. Головной мозг оставшихся особей готовили для гистопатологических исследований.

Было достоверно установлено, что первоначально мыши демонстрировали развитие тревожности, которая на более длительных сроках введения наночастиц не фиксировалась. Это объясняется «включением» адаптационных механизмов и привыканием к потенциальному токсину. На сроке введения 180 суток наблюдалось достоверное снижение контекстуальной памяти у экспериментальной группы, а также проявление «индифферентного» поведения [2].

Было обнаружено скачкообразное увеличение концентрации серебра в гиппокампе и мозжечке при сроке введения наночастиц 120 суток. В коре и остаточной части мозга концентрация также скачкообразно увеличивалась на 180 день эксперимента.

Гистопатологические исследования показали возникновение эффекта разрыхления клеток области CA2 гиппокампа, начиная со 120 суток эксперимента: нейроны располагались неравномерно и разреженно по сравнению с мозгом контрольных животных.

Таким образом, систематическое хроническое пероральное потребление наночастиц серебра приводит к изменениям в головном мозге [3]: накоплению серебра и морфологическим нарушениям, которые, в конечном итоге, вызывают дефицит долговременной контекстуальной памяти и снижении исследовательского поведения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 21-315-70016).

1. M.Ch. Sportelli, M. Izzi, E.A. Kukushkina, et. al. Can Nanotechnology and Materials Science Help the Fight against SARS-CoV-2? // *Nanomaterials*, 2020, 10, 802.

2. A. Antsiferova, M. Kopyeva, P. Kashkarov. Effects of Prolonged Silver Nanoparticle Exposure on the Contextual Cognition and Behavior of Mammals // *Materials*, 2018, 11(4):558.

3. A.A. Antsiferova, M.Yu. Kopyeva, V.N. Kochkin, P.K. Kashkarov, M.V. Kovalchuk. Disturbance in Mammalian Cognition Caused by Accumulation of Silver in Brain// *Toxics*, 2021, 9, 30.

Молекулярные и клеточные механизмы нарушения функций мозга в отдаленный период после облучения

Е.Ю. Москалева

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва

Лучевая терапия как самостоятельный метод и как составная часть комбинированной терапии – незаменимый способ в современном лечении опухолей, особенно опухолей мозга и опухолей в области головы и шеи. Она позволила значительно увеличить продолжительность жизни пациентов, но в отдаленный период у части больных были обнаружены нежелательные последствия в виде развития когнитивных нарушений – снижения памяти и способности к обучению и развития деменции в отдельных случаях [1-3]. Ионизирующее излучение всех типов способно повреждать клетки ЦНС, вызывая повреждение молекул ДНК, образование активных метаболитов кислорода и метаболический стресс. Нерепарированные повреждения ДНК приводят к гибели пролиферирующих клеток в результате митотической катастрофы, а сохраняющиеся повреждения ДНК, совместимые с жизнью клетки, являются источником мутаций, накопление которых может приводить к изменению свойств у таких клеток и их потомков и/или к их злокачественной трансформации. В ЦНС число пролиферирующих клеток ограничено популяцией нейральных стволовых/нейральных прогениторных клеток (НСК/НПК), локализованных в специальных нишах, а также небольшой частью глиальных клеток и клеток микроглии. Пострадиационное угнетение нейрогенеза, вызванное гибелью высоко радиочувствительной популяции НСК/НПК в субгранулярной зоне зубчатой извилины, приводит к снижению образования новых нейронов в мозге, нарушению способности к обучению и снижению памяти у молодых экспериментальных животных [3,4] и человека [5], что особенно важно при облучении молодых лиц.

В то же время основную часть мозга составляют не пролиферирующие клетки, и в их повреждении ведущую роль играют другие механизмы, такие как перекисное окисление липидов, повреждение митохондрий, которое усиливает окислительный стресс, изменение проницаемости микрососудов при больших дозах и нарушение межклеточных контактов и взаимодействий. Облучение приводит к непосредственному повреждению нейронов, нарушению экспрессии генов и состояния ряда рецепторов, без изменения количества клеток. Повреждение клеток ЦНС в отдаленный период происходит и в результате развития длительного окислительного стресса, вызванного нейровоспалением, в основе которого лежит активация клеток микроглии, которые секретируют провоспалительные цитокины и в свою очередь активируют астроциты. Процессы пострадиационного нейровоспаления и обусловленного им повреждения нейронов очень близки к тем процессам, которые обнаружены при нейродегенеративных заболеваниях, включая болезнь Альцгеймера. Клетки микроглии образуются в период раннего эмбрионального развития из миелиоидных клеток-предшественников костного мозга. Во взрослом головном мозге пул микроглии поддерживается в результате сбалансированных процессов пролиферации и гибели клеток путем апоптоза так, что за время жизни микроглиа обновляется целиком несколько раз [6]. В процессе развития эмбриона микроглиа участвует в ремоделировании синапсов и регуляции ангиогенеза. Во взрослом организме микроглиа помимо фагоцитоза и удаления фрагментов распадающихся клеток, участвует в устранении ненужных синапсов, в регуляции нейрогенеза, в ремоделировании сосудистой сети ЦНС (например, при инсульте), в развитии реакций клеточного иммунитета и воспаления [7]. Клетки покоящейся микроглии имеют большое количество разветвленных отростков, экспрессируют маркеры CD11b, CD40, CD45^{low}, CD80, CD86, F4/80, Iba1, CXCR3, CCR9, CSF-1R, C5aR, TMEM119. При активации они приобретают амебодную или округлую форму и фенотип CD11b⁺/CD45^{high}, экспрессируют молекулу CD68, белок-транслоказу мембраны митохондрий с молекулярной массой 18 кДа, получивший название TSPO, и начинают секретировать активные метаболиты кислорода, провоспалительные цитокины и хемокины, инициируя развитие нейровоспаления. Кроме того, клетки активированной микроглии могут непосредственно повреждать нейроны с участием системы комплемента [8]. В то же время нейроны в свою очередь могут регулировать активность микроглии. В настоящее время проходят клинические испытания эффективности ряда фармакологических препаратов для предупреждения/снижения пострадиационных когнитивных нарушений. В последние годы развиваются исследования по созданию высоко специфических ингибиторов рецептора KCCP-M1, определяющего передачу сигнала к стимуляции пролиферации клеток микроглии. Показано, что использование таких ингибиторов позволяет избирательно блокировать пролиферацию клеток микроглии и приводит к многократному уменьшению их количества [9]. Длительное снижение количества микроглии не приводило к отрицательным последствиям, хотя оно может оказаться опасным при вирусных и бактериальных инфекциях. Облучение животных после снижения микроглии позволяло избежать развития когнитивных нарушений, а отмена ингибиторов сопровождалась быстрым восстановлением количества клеток микроглии в мозге. Наряду с исследованием фармакологических средств защиты клеток мозга, важную роль играют методы защиты радиочувствительных нейрогенных зон мозга при облучении. Разрабатываются новые технологии лучевой терапии для строгой локализации воздействия в зоне опухоли и снижения повреждения нормальных тканей мозга. Перспективные результаты получены при использовании высокоэнергетического синхротронного излучения для этих целей [10].

1. Smart D. Radiation Toxicity in the Central Nervous System: Mechanisms and Strategies for Injury Reduction. *Semin Radiat Oncol.* 2017. V. 27. №4. P. 332-339.
2. Greene-Schloesser D., Robbins M.E., Peiffer A.M., et al. Radiation-induced brain injury: a review // *Front. Oncol.* 2012. V. 2. 73.
3. Yang L., Yang J., Li G., et al. Pathophysiological responses in rat and mouse models of radiation-induced brain injury. *Molecular Neurobiology.* 2017. V. 54. №2. P.1022-1032.
4. Raber J., Rola R., LeFevour A. et al. Radiation-induced cognitive impairments are associated with changes in indicators of hippocampal neurogenesis // *Radiat. Res.* 2004. V. 162. №1. P. 39-47.
5. Aarsen F.K., Paquier P.F., Arts W.F. et al. Cognitive deficits and predictors 3 years after diagnosis of a pilocytic astrocytoma in childhood // *J Clin Oncol.* 2009. V. 27. №2. P. 3526-3532.
6. Askew K., Li K., Olmos-Alonso A. Coupled Proliferation and Apoptosis Maintain the Rapid Turnover of Microglia in the Adult Brain // *Cell Reports.* 2017. V. 18. №2. P. 391-405.
7. Eyo U., Dailey M. Microglia: key elements in neural development, plasticity, and pathology. *J Neuroimmune Pharmacol.* 2013. V. 8. P. 494-509.
8. Kalm M., Andreasson U., Björk-Eriksson T. et al. C3 deficiency ameliorates the negative effects of irradiation of the young brain on hippocampal development and learning. // *Oncotarget.* 2015. V. 7. №15. P. 19382-19392.
9. Han J., Zhu K., Zhang X-M., Harris R.A. Enforced microglial depletion and repopulation as a promising strategy for the treatment of neurological disorders. // *Glia.* 2019. V.67. P. 217–231.
10. Eling L., Bouchet A., Nemoz C. et al. Ultra high dose rate Synchrotron Microbeam Radiation Therapy. Preclinical evidence in view of a clinical transfer // *Radiother Oncol.* 2019. V.139. 56 – 61.

Нерезонансные эффекты в спектроскопических экспериментах по измерению частот переходов в атомах водорода и гелия

А. А. Аникин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Спектроскопические эксперименты играют определяющую роль в проверке теоретических гипотез и результатов расчетов в самых разных областях физики, выступая ключевым инструментом понимания фундаментальных физических процессов и принципов. Развитие экспериментальной техники за последнее время позволило достичь уровня точности измерений порядка 10-15 относительной величины в атоме водорода, что уступает только точности современных атомных часов, и уже на протяжении нескольких десятилетий требует учета эффектов, столь тонких, что они могут описываться только в рамках наиболее точной теории атомной физики - квантовой электродинамики (КЭД).

Так, рассчитанные теоретически различные релятивистские КЭД-поправки уже давно включены в сборники физических констант, рекомендованных CODATA. Однако было обнаружено, что какими бы точными ни были эксперименты, между данными разных спектроскопических исследований наблюдаются расхождения, которые не могут быть устранены учетом данных поправок, что приводит к необходимости детального и строго теоретического анализа процессов, на которых основаны данные эксперименты. В качестве примера такого анализа выступают исследования процессов фотонного рассеяния на атомах и, как следствие, расчет так называемых нерезонансных (НР) эффектов. Эффект заключается в том, что вклады от различных переходов между близко лежащими энергетическими уровнями, а также их интерференция, приводят к существенному искажению наблюдаемого профиля спектральной линии, давая тем самым значительную неопределенность в измерении частоты.

Впервые НР эффект был рассмотрен в [1]. Однако уровень точности экспериментов достиг порядка величины этих эффектов только в конце прошлого века [2]. В дальнейшем был опубликован ряд работ, посвященных исследованию НР эффектов в одно- и двухфотонной спектроскопии атомов водорода и гелия, открыв по сути целое направление теоретической деятельности. Так, в частности, в работе [3] был проведен детальный анализ эксперимента по однофотонному рассеянию [4], и было показано, что учет НР эффектов может подтолкнуть к решению так называемой “загадки радиуса протона”. В работах [5] и [6] были рассмотрены различные типы экспериментов, использующих двухфотонное возбуждение атома водорода, а в работе [7] был рассмотрен эксперимент по двухфотонной спектроскопии атома гелия и исследована зависимость НР поправок от условий эксперимента. Из этих работ следует, что НР эффекты могут достигать и даже превышать уровень точности современных спектроскопических экспериментов, а также имеют специфические свойства, характерные именно для данного типа эффектов. Автором данной работы будет представлен детальный теоретический анализ НР эффектов, основанный на проведенном исследовании процессов одно- и двух-фотонного рассеяния, а также их роли в современных прецизионных спектроскопических экспериментах.

Работа выполнена при поддержке грантом РФФИ № 20-72-00003.

1. F. Low, Phys. Rev., v. 88, No. 1, p. 53, 1952.
2. L. Labzowsky et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., vol. 27, p. L439, 1994.
3. D. Solovyev et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., v. 53, No. 12, 2020.
4. A. Beyer et al., Science 358, p. 79–85, 2017.
5. A. Anikin et al., Phys. Rev. A 103, 022833, 2021.
6. А. Аникин и др., Письма в ЖЭТФ 114, 4, стр. 212, 2021.
7. T. Zalialiutdinov et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., published online, 2021.

Бета-спектрометры на основе полупроводниковых детекторов

*С. В. Бахланов, А. В. Дербин, И. С. Драчнев, И. М. Котина,
В. Н. Муратова, Н. В. Ниязова, Д. А. Семенов, М. В. Трушин,
Е. В. Унжаков, Е. А. Чмель*

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Процесс бета-распада — единственный в своем роде распад радиоактивных ядер, идущий по трехчастичной схеме и характеризующийся не моноэнергетическим, а сплошным спектров регистрируемых частиц — электронов или позитронов. Простейшая модель бета-распада была предложена Э. Ферми еще в 1934 году [1], но результаты расчётов в соответствии с этой моделью оказались удовлетворительными только для так называемых разрешенных переходов ($\Delta I = 0, 1$; $\Delta \pi = 1$) с точностью до описания электромагнитного взаимодействия с атомной оболочкой.

В настоящее время существуют хорошие методы для описания электромагнитных взаимодействий бета-частицы с ядром и оболочкой атома, но модель Ферми не дает корректного описания формы спектра, так как большинство переходов являются запрещенными и в процесс вовлекается внутренняя структура атомного ядра. Форма бета-спектра может быть описана как $F(W,Z)S(W,A,Z)PW(W-W_0)$, где W — полная энергия бета-частицы, W_0 — ее максимальное значение, P — импульс, $F(W,Z)$ отвечает за электромагнитное взаимодействие, а $S(W,A,Z)$ — ядерный форм-фактор. Этот ядерный форм-фактор может быть надёжно получен лишь экспериментально, и его знание оказывается крайне важным как для развития ядерной физики, так и для всех ее приложений, в которых имеет место бета-распад, к примеру, в экспериментах по поиску стерильного нейтрино от радиохимических бета-источников.

В данной работе рассматривается метод бета-спектрометрии с использованием кремниевых Si(Li) детекторов в схеме мишень — детектор и в схеме с полной 4π -геометрией на примере ^{144}Pr и ^{210}Bi [2,3,4]. Использование современных систем моделирования методом Монте-Карло позволяет с достаточной точностью рассчитывать функцию отклика детектора и производить измерения с точностью, равной или превосходящей магнитные и электростатические спектрометры при несопоставимо меньшей сложности реализации эксперимента. Ядерные форм-факторы ^{210}Bi , измеренные на двух установках в схеме мишень — детектор и в схеме с полной 4π -геометрией, находятся в хорошем статистическом согласии, чем подтверждают корректность использованной методики и составляют $1+(-0.4523\pm 0.0031)W+(0.0560\pm 0.0008)W^2$, самый точный на сегодняшний день результат.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-02-00097 и № 20-02-00571) и Российского Научного Фонда (№№21-12-00063)

1. E. Fermi, Attempt at a Theory of β -rays // Il Nuovo Cimento, Vol 11, p 1 (1934)
2. I. E. Alekseev, S. V. Bakhlanov, A. V. Derbin, I. S. Drachnev, I. M. Kotina, I. S. Lomskaya, V. N. Muratova, N. V. Niyazova, D. A. Semenov, M. V. Trushin, and E. V. Unzhakov, Precision measurement of the ^{210}Bi β -spectrum // Phys. Rev. C 102, 064329 (2020)
3. S Bakhlanov *et al* // J. Phys.: Conf. Ser. 1390 012117 (2019)
4. I. E. Alexeev *et al.* // NIM A, v890, pp 64-67 (2018)

Расчёт эффекта Бора-Вайскопфа в рамках одночастичной ядерной модели

Ю.А. Демидов^{1,2,3}, М.Г. Козлов^{1,2}, В.А. Ерохин³

¹НИИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина

²СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

³СПбПУ, Санкт-Петербург

Сверхтонкая магнитная аномалия в изотопическом ряду золота достигает рекордно больших значений [1]. Для извлечения ядерных магнитных моментов короткоживущих изотопов золота из оптических экспериментов поправки на сверхтонкую магнитную аномалию необходимо учитывать. Причиной больших значений аномалий является сингулярность поправки Бора–Вайскопфа [2] при стремлении ядерного g фактора к нулю.

Каллоборацией ISOLDE (CERN) недавно было выполнено измерение констант сверхтонкой структуры изотопов золота со спином $11/2$ [3]. Ядерные g факторы изотопов со спином $11/2$ на порядок больше, чем у стабильного ^{197}Au и других изотопов золота со спином $3/2$. Таким образом, поправки Бора–Вайскопфа для изотопов $11/2$ золота не так велики.

Новые экспериментальные данные позволили оценить величину поправок Бора–Вайскопфа для изотопов со спином $3/2$ и исследовать поведение этих поправок вблизи сингулярности [4]. Нуклонная структура рассматриваемых изотопов может быть описана в рамках одночастичной ядерной модели. Мы решали уравнение Шрёдингера с потенциалом Вуда–Саксона для валентного протона для того, чтобы получить распределения ядерной намагниченности для рассматриваемых изотопов. Этот метод разработан и впервые использован в работе [5]. Большие изменения величины поправок Бора–Вайскопфа связаны с сильным сокращением спинового и орбитального вкладов в ядерную намагниченность. Поэтому поправки Бора–Вайскопфа для изотопов $3/2$ золота оказываются очень чувствительны к изменению параметров ядерной модели.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 20-62-46006.

1. Ekström, L. Robertsson, S. Ingelman, G. Wannberg, I. Ragnarsson, Nucl. Phys. A 348, 25 (1980).
2. A. Bohr, V.F. Weisskopf, Phys. Rev. 77, 94 (1950).
3. A.E. Barzakh et al., Phys. Rev. C 101, 034308 (2020).
4. Yu.A. Demidov et al., Phys. Rev. A 103, 032824 (2021).
5. V.M. Shabaev et al., Phys. Rev. A 56, 252 (1997).

Аномальная зависимость вероятности ионизации и угловых распределений электронов от ориентации молекулы как эффект двухцентрковой интерференции при фотоионизации H_2^+

Д.А. Крапивин, Д.А. Тельнов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Революционные изменения техники эксперимента сделали возможными наблюдения и измерения разнообразных процессов с двухатомными молекулами в лазерных полях. Особо следует отметить интерференционные явления в спектрах электронов при надпороговой ионизации и спектрах генерации гармоник высокого порядка, в которых может закодирована важная информация о внутренней структуре молекул. В ряде работ [1] выявлена сильная зависимость ионизационной динамики от ориентации молекулы, что может быть объяснено явлением двухцентрковой интерференции.

Мы представляем теоретическое и численное исследование явления фотоионизации одноэлектронного молекулярного иона H_2^+ , приготовленного в $1\sigma_u$ состоянии при межъядерном расстоянии $R=2$ а.е., линейно-поляризованным импульсным излучением с несущей длиной волны в далекой ультрафиолетовой области. Наш подход основан на решении нестационарного уравнения Шредингера для волновой функции электрона в вытянутых сфероидальных координатах с помощью обобщенного псевдоспектрального метода [2]. Используется приближение неподвижных ядер, которое вполне оправдано в случае коротких лазерных импульсов. Расчеты выполнены для лазерных импульсов с несущей длиной волны $\lambda=12.5$ нм и пиковой интенсивностью $I_0=5\times 10^{16}$ Вт/см², а также с несущей длиной волны $\lambda=39$ нм и пиковой интенсивностью $I_0=5\times 10^{14}$ Вт/см². Огибающая импульса выбрана в виде функции $\sin^2(\pi t/T)$, где T — длительность импульса. Длительность импульса во всех расчетах равна 8 периодам колебаний поля, что составляет 333 ас при длине волны 12.5 нм и 1039 ас при длине волны 39 нм.

Проанализирована зависимость полной вероятности ионизации и спектров фотоэлектронов от ориентации оси молекулы. Наши результаты для длины волны излучения $\lambda=12.5$ нм демонстрируют аномальную зависимость вероятности ионизации от ориентации оси молекулы, при которой максимум вероятности ионизации наблюдается в случае перпендикулярной ориентации молекулы относительно поляризации внешнего поля, а ионизация при параллельной ориентации подавлена. Это явление объясняется эффектом двухцентрковой интерференции, которая определяет и свойства углового распределения фотоэлектронов. Максимумы в этом распределении расположены в окрестности угла вылета, который соответствует максимально конструктивной интерференции. При длине волны $\lambda=39$ нм и межъядерном расстоянии $R=2$ а.е. такая интерференция невозможна, и положение максимумов в картине угловых распределений фотоэлектронов определяется взаимной ориентацией вектора поляризации поля и оси молекулы. Полная вероятность ионизации при этом демонстрирует обычную зависимость от ориентации оси молекулы с максимумом при параллельной и минимумом при перпендикулярной ориентации.

1. S. Selstø, M. Førre, J. P. Hansen, and L. B. Madsen, Phys. Rev. Lett. 95, 093002 (2005).
2. D. A. Telnov and S. I. Chu, Phys. Rev. A 76, 043412 (2007)

Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии изотопов Ra

Е.А. Коновалова¹, Ю.А. Демидов^{1,2}, М.Г. Козлов^{1,2}

¹НИИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина.

²СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург.

Успешные экспериментальные исследования сверхтонкой структуры спектров короткоживущих изотопов тяжелых элементов позволили перейти к проверке различных ядерных моделей на основе прецизионных атомных расчётов. Из измеренных констант сверхтонкой структуры можно извлечь среднеквадратичные радиусы и магнитные моменты ядер. Для этого требуется провести расчёт электронной структуры атомов и ионов с учётом релятивистских эффектов, электронных корреляций и поправок квантовой электродинамики. Для точного определения ядерных магнитных моментов необходимо учесть сверхтонкую магнитную аномалию (СМА) – зависимость сверхтонких констант от размера ядра и от распределения ядерной намагниченности.

В работе представлен метод расчёта сверхтонкой аномалии [1 – 3]. Мы проверили этот метод на водородоподобных ионах. Вычисленные сверхтонкие аномалии в водородоподобных ионах хорошо согласуются с аналитическими выражениями. Затем были рассчитаны константы сверхтонкой структуры для основного состояния $7s_{1/2} \text{Ra}^+$ и состояния $7s7p \ ^1P_1$ нейтрального атома Ra. Отношение СМА для этих состояний, полученное теоретически, позволяет извлечь абсолютные величины СМА из экспериментальных данных и уточнить ядерные магнитные моменты для целого ряда изотопов Ra.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 19-12-00157.

1. Е.А. Коновалова, М.Г. Козлов, Ю.А. Демидов, А.Е. Варзакх, *Rad. Applic.* 2, 181 (2017).
2. Е.А. Коновалова, Ю.А. Демидов, М.Г. Козлов, *Оптика и спектроскопия* 10, 1420 (2020).
3. А. Е. Varzakh et al., *Phys. Rev. C* 101, 034308 (2020).

Поиск сигналов от транзитных астрофизических источников в детекторе Borexino

И.С. Ломская от лица коллаборации Borexino

НИИ «Курчатовский институт»-ПИЯФ, г. Гатчина

Регистрация нейтринного излучения является одним из самых перспективных методов для исследования транзитных астрофизических источников, таких как вспышки сверхновых, гамма-всплески, быстрые радиовсплески, слияние бинарных систем и др. [1]. Для многих из этих источников существуют модели, предсказывающие нейтринное излучение, в частности излучение нейтрино низких энергий [2, 3]. Лучшим инструментом для исследования нейтрино с энергиями до 5 МэВ является детектор Borexino.

Borexino – жидкий сцинтилляционный детектор, расположенный в лаборатории Гран-Сассо (Италия) на глубине 3450 м водного эквивалента [4]. Детектор выполнен по принципу «русской матрешки», он состоит из слоев последовательной защиты. Наружный бак представляет собой цилиндр с полусферическим верхом, диаметром 15.8 м, высотой 15.1 м, заполненный сверхчистой водой для защиты от внешней гамма- и нейтронной активности. Бак также выполняет роль черенковского мюонного вето, он просматривается 208-ю 12” фотоэлектронными умножителями (ФЭУ). Внутри цилиндра расположен внутренний детектор, имеющий сферическую форму радиусом 6.75 м и заполненный псевдокумулятором (РС). Внутри сферы расположены две нейлоновые сферы толщиной 150 мкм из особо чистого нейлона, разделяющие ее на буферный слой и центральный чувствительный объем. Внутренняя емкость детектора заполнена 278 т сверхчистого сцинтиллятора на основе псевдокумулятора с добавкой, обеспечивающей брэгговский сдвиг спектра в область максимальной чувствительности ФЭУ. Детектор просматривается 2209-ю 12” ФЭУ, обеспечивающие хорошее энергетическое и пространственное разрешение. В основе анализа нейтринного сигнала лежат два физических явления – это упругое рассеяние нейтрино на электроны и реакция обратного бета-распада.

Для поиска сигнала мы использовали открытые базы данных, включающие в себя информацию с радиотелескопов [5], а также базу данных LIGO/Virgo [6] для гравитационных волн. Был проведен временной корреляционный анализ и были установлены наиболее строгие верхние пределы на флюенс нейтрино от этих источников.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-02-00097 и № 20-02-00571) и Российского Научного Фонда (№№21-12-00063).

1. Branchesi M. Multi-messenger astronomy: gravitational waves, neutrinos, photons, and cosmic rays // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. V. 718. 022004 p.
2. Petroff E., Hessels J.W.T., Lorimer D.R. Fast Radio Bursts // The Astronomy and Astrophysics Review. 2019. V. 27.
3. Brian D. Metzger, Ke Fang, Ben Margalit. Neutrino Counterparts of Fast Radio Bursts // The Astrophysical Journal Letters. 2020. V. 902. №. 1.
4. The Borexino detector at the Laboratori Nazionali del Gran Sasso / Borexino collaboration // NIM A. 2009. V. 600. I. 3. P. 568-593.
5. FRB catalogue [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://frbcat.org>, свободный. – (дата обращения: 15.09.2021)
6. GravitationalWaveOpenScienceCenter [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.gwopenscience.org/data/>, свободный. – (дата обращения: 15.09.2021)

Восстановление нейтральных пионов в калориметре PHOS методом наложенных кластеров

В.А. Кусков, Д.С. Блау, Д.Ю. Пересунько

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва

Согласно предсказаниям квантовой хромодинамики (КХД), при высоких температурах и плотностях сильно взаимодействующая материя находится в состоянии кварк-глюонной материи (КГМ) [1]. Установление границ между КГМ и адронным состоянием вещества является важной задачей исследования фазовой диаграммы КХД. Нейтральные пионы, являющиеся легчайшими адронами, обильно рождаются при столкновении тяжелых ядер при энергиях Большого адронного коллайдера (БАК), поэтому служат удобным инструментом в изучении КГМ.

Эксперимент ALICE на БАК ориентирован непосредственно на изучение КГМ. В состав детектора ALICE входит прецизионный фотонный спектрометр (PHOS), разработанный для измерения энергии фотонов и нейтральных мезонов [2]. Акцептанс PHOS составляет $\Delta\varphi = 70^\circ$, $|\eta| = 0.12$ [3].

Целью данной работы является значительное расширение диапазона реконструкции нейтральных пионов с помощью метода наложенных кластеров. Стандартные методы по реконструкции π^0 – это метод инвариантных масс пары фотонов, зарегистрированных в калориметре или с помощью метода фотонной конверсии в трековой камере. Возможно также и комбинирование данных методов. При восстановлении π^0 методом инвариантных масс используются кластеры в калориметре — набор ячеек, в которых произошло энерговыделение от электромагнитного ливня, начавшегося в материале калориметра при попадании в него фотона. Однако при росте энергии π^0 угол разлета дочерних фотонов уменьшается, таким образом, при больших энергиях такие фотоны в электромагнитном калориметре образуют один кластер. При не слишком больших энергиях π^0 такие кластеры можно разделить с помощью алгоритма «unfolding» на два по локальным максимумам – ячейкам, энерговыделение в которых выше чем в соседних на определенный порог, для PHOS такой порог выбран равным 30 МэВ [4]. Однако, при еще больших энергиях π^0 уже не удастся разделить наложенные кластеры. В таком случае, уже неразделенный кластер можно использовать как сигнал и применять однокластерный анализ для восстановления π^0 . В электромагнитном калориметре EMCal, в том же эксперименте ALICE, метод наложенных кластеров успешно применялся начиная с поперечного импульса π^0 в 20 ГэВ/с [5]. Для PHOS такая граница ожидается при 40 ГэВ/с, т.к. размер ячейки в PHOS меньше чем в EMCal в 2 раза.

При анализе Монте-Карло данных pp-столкновений при $\sqrt{s} = 13$ ТэВ оценена эффективность реконструкции пионов и чистота пионного спектра при использовании неразделенных кластеров в PHOS. Вклад наложенных кластеров от π^0 в общей выборке неразделенных кластеров достигает 75%, начиная с энергии кластеров 40 ГэВ, при меньших энергиях подавляющий вклад составляют одночастичные кластеры (в основном от фотонов), также присутствуют кластеры, содержащие фотоны, электроны или продукты конверсии фотона⁰ и загрязнение адронами.

Для увеличения чистоты спектра наложенных кластеров применялся дополнительный отбор по форме электромагнитного ливня в кластере. Для его характеристики использовались собственные значения двумерной дисперсионной матрицы ливня в плоскости калориметра. Для наложенных кластеров характерна вытянутость вдоль большего собственного значения ливня M_{02} [4], соответственно, ограничения налагались именно на эту переменную. При энергии кластеров до 30 ГэВ такой отбор неэффективен, так как сливаются только кластеры фотонов с существенно разными энергиями. При энергиях свыше 30 ГэВ нижняя граница M_{02} параметризовалась в зависимости от энергии кластеров. В итоге чистота наложенных кластеров повышается до уровня 90%, при этом эффективность реконструкции пионов составляет 70% в диапазоне энергий кластеров от 30 ГэВ до 120 ГэВ. Также предложены параметризации, увеличивающие чистоту наложенных кластеров от π^0 до 95% в диапазоне от 30 ГэВ до 120 ГэВ за счет падения эффективности до 50%.

Разработанный метод позволит улучшить точность измерения π^0 с помощью PHOS в области выше 40 ГэВ/с и, таким образом, существенно расширит измеряемый диапазон спектров таких мезонов.

1. Gross D. J., Wilczek F. Asymptotically Free Gauge Theories - I // Phys. Rev. D. — 1973. — Vol. 8. — P. 3633–3652.
2. Dellacasa G et al. (ALICE Collaboration) ALICE Photon Spectrometer (PHOS): technical design report, CERN-LHCC-99-004
3. D Blau and on behalf of ALICE collaboration 2020 J. Phys.: Conf. Ser. 1690 012044
4. Alessandro B et al. (ALICE Collaboration) 2006 ALICE: physics performance report, volume II J. Phys. G 32 1295
5. Production of π^0 and η mesons up to high transverse momentum in pp collisions at 2.76 TeV / S. Acharya [et al.] // Eur. Phys. J. C. — 2017. — Vol. 77, no. 5. — P. 339.

Исследование сосуществования форм в ^{96}Zr и ^{96}Mo в рамках одномерной геометрической коллективной модели

Мардыбан М.А.^{1,2}, Сазонов Д.А.^{1,2}, Колганова Е.А.^{1,2}, Джолос Р.В.^{1,2}, Шнейдман Т.М.²

¹Государственный университет «Дубна», Дубна
²Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Сосуществование форм - интересное явление, которое может встречаться во многих ядрах. Появление разных форм связано с эволюцией оболочечной структуры и изменением заполнения нуклонных орбиталей с энергией возбуждения [1,2,3]. Теоретический подход для рассмотрения подобных явлений, связанных с динамикой формы ядра, основывается на коллективной модели ядра. Основная идея этой модели заключается в том, что, хотя такая квантовая система многих тел как атомное ядро характеризуется огромным количеством степеней свободы, они формируют коллективные моды, которые играют решающую роль в определении структуры низколежащих состояний ядер.

Основной целью работы являлось исследование свойств низколежащих коллективных состояний ядер ^{96}Zr и ^{96}Mo на основе коллективного квадрупольного гамильтониана Бора. Экспериментальные данные указывают на сосуществование сферической и деформированной структур в ^{96}Zr со слабым смешиванием соответствующих амплитуд. Основываясь на коллективном гамильтониане Бора с потенциалом, имеющим сферический и деформированный минимумы, в настоящей работе были проанализированы свойства низколежащих состояний этого ядра. В работе подбирался потенциал таким образом, чтобы описать экспериментальные данные по энергиям возбуждения 0_1^+ , 0_2^+ , 2_1^+ и 2_2^+ состояний и вероятностям E2 переходов $V(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$, $V(E2; 2_2^+ \rightarrow 0_2^+)$ и $V(E2; 2_2^+ \rightarrow 0_1^+)$ [4]. Далее с полученным потенциалом были вычислены вероятности переходов $V(E2; 2_2^+ \rightarrow 2_1^+)$ и $V(M1; 2_2^+ \rightarrow 2_1^+)$, которые оказались в хорошем согласии с экспериментом, и предсказаны величины $V(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_2^+)$ и $Q(2_2^+)$. Также в работе показано, что низкоэнергетическая структура ^{96}Mo может быть удовлетворительно воспроизведена в геометрической модели с потенциальной функцией, поддерживающей сосуществование формы.

Таким образом, в работе показано, что геометрическая модель позволяет объяснить свойства коллективных квадрупольных возбуждений и слабое смешивание сферических и деформированных конфигураций в ядрах ^{96}Zr и ^{96}Mo . Анализ указывает на важность учета зависимости ротационного коэффициента инерции от деформации, необходимость учета оболочечных эффектов при рассмотрении M1 переходов и влияние парных вибраций на E0 переходы.

1. Cejnar P., Jolie J., Casten R. F. Rev. Mod. Phys. 2010. 82: 2155.
2. Heyde K., Wood J. L. Rev. Mod. Phys. 2011. 83: 1655.
3. Jolos R.V. Models of Atomic Nucleus: Textbook.-Dubna: ОИЯИ, 2012.-109p.
4. Kremer C. et al. Phys. Rev. Lett. 2016. 117: 172503.

Натуральные спиноры переходов и прогнозирование возможности лазерного охлаждения молекул

Д.А. Макинский^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

² МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Натуральные спиноры переходов (NTS) – релятивистские аналоги натуральных орбиталей электронных переходов [1] в молекулах и молекулярных ионах; они могут играть аналогичную роль в интерпретации результатов расчётов молекулярной электронной структуры из первых принципов в релятивистском случае. Один из наиболее перспективных методов моделирования возбуждённых состояний молекул и молекулярных ионов, содержащих ядра тяжёлых элементов, – релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока (FS-RCC). Прямой расчёт матриц плотности перехода и, следовательно, истинных NTS как их сингулярных векторов этим методом крайне трудоёмок. Поэтому при построении приближения для матриц плотности перехода вместо полных волновых функций в данной работе используются только их проекции на модельное пространство FS-RCC, содержащие основную информацию об особенностях волновых функций в валентной области. Соответствующие сингулярные векторы принято называть модельными NTS.

Для интерпретации особенностей переходов в терминах NTS целесообразно визуализировать эти объекты. В предлагаемой работе использовалась модель релятивистских псевдопотенциалов, в рамках которой NTS являются двухкомпонентными комплексными функциями в трёхмерном пространстве. Существующие способы визуализации молекулярных спиноров предполагают 3D-представление квадратов абсолютных значений их компонент изоповерхностями и индикацию фаз при помощи цветовой гаммы либо визуализацию скалярного квадрата спинора и векторного поля локальной намагниченности [2]. Эти способы не кажутся оптимальными для восприятия и выявления особенностей NTS. В данной работе рассматриваются альтернативные способы визуализации: 3D-представление действительной и мнимой части каждой компоненты NTS изоповерхностями либо их 2D-представление изолиниями для выбранного сечения.

Анализ натуральных спиноров переходов, в полной аналогии с анализом натуральных орбиталей переходов [3], может иметь большое значение для первичной оценки возможности прямого лазерного охлаждения молекул и молекулярных ионов соединений тяжёлых элементов. Прямое лазерное охлаждение молекул возможно в случае квазидиагональности матрицы Франка – Кондона, что достигается при симбатности потенциальных поверхностей электронных состояний, переходы между которыми участвуют в цикле лазерного охлаждения. Такая симбатность наблюдается, в частности, в тех случаях, когда NTS для перехода между этими состояниями, соответствуют сходному характеру химической связи (например, оба являются несвязывающими). Методом FS-RCC выполнены расчёты потенциальных поверхностей основных и низколежащих возбуждённых состояний для нескольких простых молекул и молекулярных ионов, содержащих атомы Ra и Pa, вычислены, визуализированы и проанализированы модельные NTS. Продемонстрирована корреляция между изменением равновесных параметров при возбуждении и особенностями NTS “ухода” и “прихода”. Для расчётов использована реализация FS-RCC в варианте с учётом одно- и двукратных возбуждений, включающая модуль расчёта коэффициентов разложения модельных NTS по базисным функциям, в пакете EXP-T [4] с вычислением молекулярных интегралов и решением уравнений ССП для вакуумного состояния при помощи комплекса DIRAC [5].

1. Martin R.L. Natural transition orbitals. // J. Chem. Phys. – 2003. – Vol. 18, 4775–4777.
2. Al-Saadon R., Shiozaki T., Knizia G. Visualizing Complex-Valued Molecular Orbitals. // J. Phys. Chem. A. – 2009. – Vol. 123, 3223–3228.
3. Ivanov M.V., Bangerter F.H., Krylov A.I. Towards a rational design of laser-coolable molecules: insights from equation-of-motion coupled-cluster calculations. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2009. – Vol. 21, 19447– 19457.
4. Oleynichenko A.V., Zaitsevskii A., Eliav E. Towards high performance relativistic electronic structure modelling: The EXP-T program package. // Commun. Comput. Inf. Sci. – 2020. – Vol. 1331, 375–386.
5. The DIRAC code for relativistic molecular calculations. / Saue T., Bast R., Gomes A.S.P., et al. // J. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 152, 204104.

Описание низколежащих состояний ^{96}Zr на основе коллективного квадрупольного гамильтониана Бора с включением триаксиальной степени свободы

Е.В. Мардыбан^{1,2}, Е.А. Колганова^{1,2}, Р.В. Джолос^{1,2}, Т.М. Шнейдман²

¹Государственный Университет “Дубна”, Дубна

²Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна

Феномен сосуществования сферических и деформированных состояний в ядре в последние годы стал предметом активных исследований. Возникновение различных форм связано с эволюцией оболочечной структуры с энергией возбуждения и различной заселенностью нуклонных орбиталей (см. обзор [1]). В работах [2,3] показано, что возникновение сосуществования форм может быть связано с существованием достаточно большой энергетической щели между подоболочками. Для изучения этого явления используются различные теоретические подходы, например модель взаимодействующих бозонов со смешиванием конфигураций с различным числом бозонов (IBM-CM) [4]. Оболочечные расчеты с учетом большого количества оболочек (LSSM) [5], или исследования среднего поля с использованием самосогласованного метода Хартри-Фока-Боголюбова (HFB) [6].

Недавние эксперименты по измерению вероятностей $E2$ и $M1$ переходов между низколежащими возбужденными состояниями ^{96}Zr [7] указывают на сосуществование в этом ядре как сферических, так и деформированных структур с малыми амплитудами смешивания. В нашей работе [8] наблюдаемые свойства коллективных возбуждений ^{96}Zr исследуются на основе геометрической коллективной модели. Рассмотрение основывается на коллективном квадрупольном гамильтониане Бора с потенциальной имеющим сферический и деформированный минимум. Относительная глубина двух минимумов, высота и ширина барьера и жесткость потенциала вблизи обоих минимумов определялись так, чтобы добиться удовлетворительного описания наблюдаемых свойств низколежащих коллективных состояний ^{96}Zr .

В работе получено хорошее согласие с экспериментальными данными по приведенным вероятностям $E2$ переходов. Показано, что для корректного определения коллективного потенциала из экспериментальных данных необходимо рассмотрение в рамках полного коллективного гамильтониана Бора с учетом как аксиально-симметричной, так и триаксиальной квадрупольной деформации. Показано, что энергия второго возбужденного состояния 2^+_2 может быть воспроизведена только в случае, если в области деформированного минимума вращательный коэффициент инерции в четыре раза меньше, чем колебательный. Продемонстрирована важность учета оболочечных эффектов при описании вероятностей $M1$ переходов.

1. Heyde K., Wood J.L. Rev.Mod.Phys. 2011. 83. 1467.
2. Togashi T., Tsunoda Y., Otsuska T., Shimizu N. Phys.Rev.Lett. 2016. 117. 172502.
3. Chakraborty A., et al. Phys. Rev. Lett. 2013. 110. 022504.
4. Garcia-Ramos J.E., Heyde K. Phys.Rev. C. 2019. 43. 044315.
5. Vretenar D., Naksic T., Li Z. JPS Conf. Proc. 2018. 23. 012017.
6. Bender M., Heenen P.-H., Reinhard P.-G. Rev. Mod. Phys. 2003. 75. 121.
7. Kremer C., Aslanidou S., Bassauer S., Hilcker M., Krugmann A., von Neumann-Cosel P., Otsuka T., Pietralla N., Ponomarev V. Yu., Shimizu N., Singer M., Steinhilber G., Togashi T., Tsunoda Y., Werner V., Zweidinger M. Phys. Rev. Lett. 2016. 117, 172503.
8. Mardyban E.V., Kolganova E.A., Shneidman T.M., Jolos R.V., Pietralla N. Phys. Rev. C. 2020. 102, 034308.

Поиск частиц темной материи в канале моно- Z в эксперименте АТЛАС

М.В. Покидова^{1,2}

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

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

Поиск частиц темной материи (ТМ) - одна из важнейших задач современной физики элементарных частиц. Природа частиц темной материи и их взаимодействие с частицами Стандартной модели (СМ) до сих пор неизвестны. К настоящему времени существуют различные модели, которые описывают взаимодействие частиц ТМ с частицами СМ [1]. Одним из кандидатов на роль частиц ТМ являются слабовзаимодействующие массивные частицы (WIMP) [2], которые взаимодействуют с веществом только посредством гравитации и некоего слабого взаимодействия [3]. Поиски частиц темной матери проходят в разных экспериментах, в том числе и на Большом адронном коллайдере (БАК). Так как частицы ТМ не регистрируются в современных детекторах, то в экспериментах на БАК рождение частиц ТМ изучается в процессах моно X [1], где X - это дополнительно регистрируемый Z или W – бозон, фотон или струя, которые излучаются до взаимодействия кварков.

В работе были проанализированы данные эксперимента ATLAS, полученные во втором периоде работы БАК (2015-2018 годах) при энергии столкновений протонов в системе центра масс $\sqrt{s} = 13$ ТэВ, и соответствующие интегральной светимости 139 фбн^{-1} . В анализе отбирались события с двумя лептонами от распада Z -бозона и с недостающей поперечной энергией $E_T^{miss}(Z \rightarrow l^+l^- + E_T^{miss}(l = e, \mu))$, которая может быть обусловлена рождением частиц ТМ. Основными фоновыми процессами являются процессы с рождением пары Z -бозонов (ZZ), одновременным рождением W и Z бозонов (WZ) и процесс с рождением Z -бозона и струй ($Z + \text{jets}$). Для оценки вклада фоновых процессов использовались методы, основанные на Монте-Карло и data-driven методы. Анализировался спектр по E_T^{miss} . В ходе работы отклонений от предсказаний СМ не обнаружено. Интерпретация данных проводилась в рамках как упрощенной модели, так и в рамках двухдублетной модели Хиггса с дополнительным псевдоскалярным медиатором (2HDMa) [5]. Для статистического анализа использовалась программа TRExFitter, основанная на методе Profile Likelihood [4]. Произведена оценка экспериментальных и теоретических систематических ошибок. Получены верхние пределы на массу частиц ТМ в зависимости от массы промежуточной частицы (медиатора), для аксиально векторного и векторного медиаторов. Исключены массы медиатора до 975 ГэВ [6]. Проведено сравнение с результатами экспериментов по прямому поиску частиц ТМ.

1. Collaboration, ATLAS. Search for an invisibly decaying Higgs boson or dark matter candidates produced in association with a Z boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. The European Physical Journal.2015.
2. Trevisani, Nicolò. Collider searches for dark matter (ATLAS + CMS)// Universe. 4. 131. 2018. — 2 с.
3. Abdallah, Jalal et al. Simplified Models for Dark Matter Searches at the LHC. Physics of the Dark Universe 9-10 .2015. — 5 с.
4. Cole SR, Chu H, Greenland S. Maximum likelihood, profile likelihood, and penalized likelihood: a primer. Am J Epidemiol. 2014
5. M. Bauer, U. Haisch and F. Kahlhoefer, Simplified dark matter models with two Higgs doublets: I. Pseudoscalar mediators, JHEP 05. 2017
6. <https://atlas.web.cern.ch/Atlas/GROUPS/PHYSICS/CONFNOTES/ATLAS-CONF-2021-029/>

Расчёт поправки Бора-Вайскопфа к сверхтонкой структуре тяжёлых атомов

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

¹НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

²СПбГУ, Санкт-Петербург

В последние годы благодаря современным спектроскопическим методам был накоплен значительный объём данных по сверхтонкому расщеплению в атомах и молекулах. Для их анализа и интерпретации помимо прецизионного расчёта электронной структуры рассматриваемой системы необходимо также учесть распределение заряда (поправка Брейта-Розенталя [1]) и намагничённости (поправка Бора-Вайскопфа [2]) по объёму ядру.

В ходе проделанной работы была разработана программа для вычисления поправки Бора-Вайскопфа в одночастичной модели ядра, в которой распределение валентного нуклона находится из решения уравнения Шрёдингера с потенциалом Вудса-Саксона. С её помощью были произведены расчёты сверхтонкой структуры нейтрального атома Tl, а также сверхтонкой магнитной аномалии – специальной комбинации констант сверхтонкого взаимодействия и g-факторов двух различных изотопов, достаточно чувствительной к различиям в распределении намагничённости. Полученные результаты приведены в статье [3]. При их сравнении с результатами в модели равномерно намагничённого шара [4] было проверено, что с достаточной степенью точности отношение аномалий для двух различных электронных состояний является стабильным относительно выбора ядерной модели и ее параметров [5]. Данный факт важен, так как используется для предсказания магнитных моментов короткоживущих изотопов. В частности, он был использован и в работе [3] при определении магнитных моментов нескольких изотопов Tl. Кроме того, был произведён расчёт дифференциальной сверхтонкой аномалии в указанных выше моделях ядра и проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Помимо атома Tl, были произведены расчёты сверхтонкой структуры и сверхтонкой магнитной аномалии для нейтрального атома Cd.

Исследование атома Tl выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10019). Расчёты методом Дирака-Фока были поддержаны Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 21-1-2-47-1).

1. M. Crawford, Phys. Rev. 76, 1310 (1949).
2. Bohr and V. Weisskopf, Physical Review 77, 94 (1950).
3. Prosnyak, S. D., Skripnikov, L. V., Phys. Rev. C 103, 034314. (2021).
4. Prosnyak, S. D., Maison, D. E., & Skripnikov, L. V., The Journal of Chemical Physics, 152(4), 044301. (2020).
5. S. Schmidt, J. Billowes, M. Bissell, K. Blaum, R. G. Ruiz, H. Heylen, S. Malbrunot- Ettenuer, G. Neyens, W. Nörtershäuser, G. Plunien, et al., Phys. Lett. B 779, 324 (2018).

События с большими быстротными провалами в протон-ядерных столкновениях при энергиях БАК 8 ТэВ

С.А. Насыбулин¹, В.Т. Ким^{1,2}, Д.Е. Соснов¹

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина

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

При высоких энергиях сталкивающихся адронов и ядер существенная часть регистрируемых событий имеет дифракционную картину, характеризующиеся обменом малыми импульсами с распадом одного или обоих сталкивающихся объектов, в дифракционные пучки адронов с сохраняющимися квантовыми числами первичных частиц или ядер. Феномен дифракции глубоко связан с фундаментальными свойствами КХД [1]. Для описания таких событий при высоких энергиях широко используется подход Грибова-Редже с введением так называемого померона – виртуальной частицы с квантовыми числами вакуума, посредством обмена которыми взаимодействующие в столкновении адроны или ядра обмениваются импульсом без изменения собственных квантовых чисел [2-7]. С экспериментальной точки зрения, дифракционные события определяются наличием как минимум одного существенного провала (large rapidity gap) в распределении образованных частиц по (псевдо)быстроте.

Исследование дифракционных событий в протон-ядерных столкновениях позволяет лучше узнать динамику сильных взаимодействий, чтобы использовать эти данные для как можно более реалистичных описаний различных процессов, как, например, прохождение космических лучей сверхвысоких энергий через земную атмосферу с образованием широких адронных ливней [8, 9]. Однако в дифракционных столкновениях с участием тяжёлых ядер вследствие их большого электрического заряда может оказаться существенным, наряду с померонным, взаимодействие посредством обмена фотонами [10].

В данной работе представлены оценки вкладов упомянутых выше механизмов дифракционного взаимодействия в сечение событий, характеризующихся большой величиной быстротных провалов. Произведено моделирование протон-ядерных столкновений, с учётом различных параметризаций померонного и электромагнитного обменных взаимодействий. Полученные оценки вкладов обменов померонами и фотонами сравниваются с недавними предварительными измерениями эксперимента CMS на БАК при энергии протон-свинцовых соударений 8 ТэВ в системе протон-нуклон ядра [11].

Показано, что A -зависимость в дифракционных протон-свинцовых соударениях соответствует ожидаемой согласно теории Глаубера-Грибова для рассеяния адронов на ядерных мишенях. В случае же ультрапериферических столкновений с фотонным обменом, Z -зависимость оказывается аномально высокой, что свидетельствует о значительном когерентном фотонном вкладе.

1. Kaidalov A. B. Diffractive Production Mechanisms // Phys. Rept. 1979. т. 50. с. 157. doi:10.1016/0370-1573(79)90043-7.
2. Gribov V. N. Possible Asymptotic Behavior of Elastic Scattering // JETP Lett. 1961. т. 41. с.667.
3. Chew G. F., Frautschi S. C. Principle of Equivalence for All Strongly Interacting Particles Within the S Matrix Framework // Phys. Rev. Lett. 1961. т. 7. с. 394. doi:10.1103/PhysRevLett.7.394.
4. Donnachie A., Landshoff P. V. Elastic Scattering and Diffraction Dissociation // Nucl. Phys. B.1984. т. 244. с. 322. doi:10.1016/0550-3213(84)90315-8.
5. Low F. E. A Model of the Bare Pomeron // Phys. Rev. D. 1975. т. 12. с. 163. doi:10.1103/PhysRevD.12.163.
6. Nussinov S. A Perturbative Recipe for Quark Gluon Theories and Some of Its Applications // Phys. Rev. D. 1976. т. 14. с. 246. doi:10.1103/PhysRevD.14.246.

Разработка модуля для моделирования излучения при каналировании релятивистских заряженных частиц в монокристаллах в программном комплексе Geant4

А.А. Савченко^{1,2,3}, В. Вагнер¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

³Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

В развитии современной науки происходит переход к этапу, когда теоретическое описание не является достаточным для анализа и воспроизведения некоторых экспериментальных данных, поскольку все чаще исследуются явления, требующие для своего изучения комплексных детектирующих установок. Именно поэтому в настоящее время в физике взаимодействия излучения и частиц с веществом масштабно начинают использоваться комплексы программ – мощные инструменты компьютерного моделирования. В данном докладе обсуждается создание и интеграция в программный комплекс Geant4 [1-3] высокоэффективного открытого кода на языке C++ для моделирования процессов излучения инициированного ультрарелятивистской заряженной частицей, проходящей через монокристалл - излучение при каналировании [4] (излучение при движении частиц в канале, образованном кристаллографическими плоскостями или осями кристалла), когерентное тормозное излучение [5], с учетом таких важных эффектов, как деканалирование [6,7] (как при плоскостном, так и при осевом каналировании), недипольность излучения [8,9] и т.д., оказывающих значительное влияние на спектральное распределение и интенсивность излучения. Разрабатываемый код будет внедрен в Geant4 в виде модуля – дискретного набора физических процессов. Такая интеграция даст возможность комбинировать физические процессы в монокристаллах с уже встроенными в Geant4, что существенно увеличит качество моделирования. Также непосредственное вычисление излучения в Geant4 не только ускорит расчет, но и позволит описывать более сложные устройства, что окажется востребованным мировым физическим сообществом в области физики детекторов, медицинской и ускорительной физики.

Работа выполнена при финансовой поддержке конкурсной части госзадания по созданию и развитию лабораторий, проект № FZWG-2020-0032 (2019-1569).

1. J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis et al., Recent Developments in Geant4 // Nucl. Instrum. Meth. A. 2016. Vol. 835. P. 186.
2. J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis et al., Geant4 Developments and Applications // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2006. Vol. 53. P. 270.
3. S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako et al., Geant4 - A Simulation Toolkit // Nucl. Instrum. Meth. A. 2003. Vol. 506. P. 250.
4. M. A. Kumakhov, On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal // Phys. Lett. 1976. Vol. 57A. P. 17.
5. M.L. Ter-Mikaelian, High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media // Wiley, New York, (1972).
6. B. Azadegan, W. Wagner, A.A. Savchenko, A.A. Tishchenko, Simulation of Channeling Radiation and Positron Production in Thick Diamond Structures and a Tungsten Single Crystal // Rad. Phys. Chem. 2019. Vol. 157. P. 84.
7. H. Backe, P. Kunz, W. Lauth, A. Rueda, Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI // Nucl. Instrum. Methods B. 2008. Vol. 266. P. 3835.
8. B. Azadegan, S.B. Dabagov, W. Wagner, Computer Simulation of the Radiation of Electrons Axially Channeled in a Thin Ge Single Crystal // Nucl. Instrum. Methods B. Vol. 269. P. 2098.
9. W. Wagner, A.A. Savchenko, B. Azadegan, M. Shafeei, Nondipolarity of Axial Channeling Radiation at GeV Beam Energies // Phys. Rev. - Accelerators and Beams. 2019. Vol. 22. P. 054502.

Изучение рождения очарованных барионов в протон-протонных взаимодействиях при энергиях 7 и 8 ТэВ в системе центра масс

В.В. Чуликов

НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Для описания динамики процессов рождения адронов, появляющихся в различных взаимодействиях экспериментальной физики высоких энергий, необходимо иметь информацию о процессе фрагментации, то есть о вероятности формирования партоном конкретного типа адронов в конечном состоянии. Процесс фрагментации тяжело поддается моделированию, а информация о нем может быть получена путем анализа функций перехода [1]. Функции перехода могут быть измерены посредством оценки отношений дифференциальных сечений рождения адронов. В настоящее время в экспериментах электрон-позитронных, электрон-протонных и протон-протонных взаимодействий с высокой точностью измерены функции перехода для D -мезонов и Λ_c -барионов [2]. Однако не существует работ по оценке функций перехода для тяжелых очарованных барионов Ξ_c . Функции перехода для Ξ_c могут быть извлечены из отношения сечений этих барионов, полученных при помощи анализа данных протон-протонных взаимодействий в эксперименте LHCb.

Целью нашей работы является получение отношений дифференциальных сечений очарованных Ξ_c барионов в протон-протонных взаимодействиях при энергиях 7 и 8 ТэВ в системе центра масс. На основе предложенного выше подхода, а именно, путем анализа выходов очарованных барионов, были получены искомые соотношения. Для оценки систематических неопределенностей, связанных с эффективностью регистрации заряженных частиц, были использованы наборы данных, полученных с использованием генераторов EvtGen и Pythia 8.

1. Мангано М. Л. Квантовая хромодинамика и физика адронных столкновений УФН 180:2 113–138 (2010).
2. М. Lisovyi, А. Verbytskyi, О. Zenaiev Combined analysis of charm-quark fragmentation-fraction measurements. Eur. Phys. J. C 76, 397 (2016).

Исследование рождения системы $\eta\pi$ в кулоновском поле ядра на пионном пучке с импульсом 29 ГэВ/с

А.А. Шумаков

НИИЦ «Курчатовский институт» - ИФВЭ, Протвино

Исследовано эксклюзивное рождение системы $\eta\pi^-$ на пучке π -мезонов с импульсом 29 ГэВ/с, взаимодействующего с бериллиевой мишенью на установке ВЕС. Основной целью исследования было изучение рождения этой системы в кулоновском поле ядра бериллия в результате нерезонансного «примаковского» процесса [1]. Подобные процессы предполагают фотоны в начальном состоянии, что позволяет изучать форм-факторы вершин, содержащих фотоны, в кинематической области, не свойственной распадам с участием фотонов.

В анализе использовались данные, набранные установкой ВЕС в 2012-2016 гг. Установка ВЕС является широкоапертурным магнитным спектрометром, предназначенным для регистрации заряженных треков и γ -квантов, возникающих при взаимодействии пучковой частицы в фиксированной мишени. Установка получает пучок от ускорителя У-70.

Для выделения вклада нерезонансного «примаковского» процесса, система исследовалась при малых инвариантных массах и малых переданных импульсах. Анализ произведён для разных каналов распада η -мезона: $\eta \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$, $\eta \rightarrow \gamma\gamma$ и $\eta \rightarrow \pi^0\pi^0\pi^0$. Конечные состояния для этих распадов являются сильно разными с точки зрения регистрации и реконструкции события, что позволяет не только увеличить статистику, но и контролировать систематические погрешности. Отдельное внимание уделено методам отчистки от неэксклюзивного фона. Приведены используемые статистические методы выделения слабого вклада исследуемого процесса на фоне других возможных механизмов рождения системы $\eta\pi^-$ в данной постановке эксперимента. Обсуждается модельная зависимость результатов.

Измерено сечение исследуемого процесса и оценены систематические и статистические ошибки. Полученный результат сравнивается с экспериментальными данными при других энергиях пучка [2] и теоретическим предсказанием, использующем модель из [3].

1. A. Halprin, C. M. Andersen and H. Primakoff, Phys. Rev. 152 (1966), 1295-1303
2. D. V. Amelin et al, URL: <https://arxiv.org/pdf/hep-ex/9810032.pdf>
3. E. P. Venugopal and B. R. Holstein, Phys. Rev. D 57, 4397 (1998)

Исследование наработки медицинского изотопа ^{89}Zr в фотоядерных реакциях

М.В. Желтоножская¹, В.А. Желтоножский², П.Д. Ремизов¹, А.П. Черняев^{1,2}

¹ *Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва*

² *Научно-исследовательский Институт Ядерной Физики им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

Иммуно-ПЭТ – новейшая методика радионуклидной диагностики, использующая в качестве переносчиков моноклональные антитела. Поскольку антитела имеют время жизни в организме от нескольких дней до недель, а оптимальное соотношение сигнала в опухоли к фону достигается через несколько суток после инъекции [1], то оптимальным периодом полураспада обладает изотоп ^{89}Zr (78,41 ч). После его распада образуется стабильный изотоп ^{89}Y , при этом в 22,74 % случаев распада испускаются позитроны, обеспечивающие разрешение позитронно-эмиссионной томографии (ПЭТ) на уровне наиболее популярного ПЭТ-изотопа ^{18}F [2]. Ближайший аналог ^{89}Zr , ^{124}I , уступает в разрешении, контрастности (из-за наличия гамма-линии 603 кэВ) и плохо удерживается в клетках [2, 3].

Традиционно ^{89}Zr получают на медицинских циклотронах в реакции (p, n) при энергии протонов порядка 11 МэВ. Метод удобен тем, что в качестве мишени используется иттрий, химически неактивный металл, состоящий из единственного стабильного изотопа ^{89}Y . Однако особую проблему представляет исключение изотопных примесей ^{88}Zr (83,4 дней), образующегося в (p, 2n) реакции, и его дочернего изотопа ^{88}Y (106 дней). Поэтому поиск альтернативных способов получения ^{89}Zr является актуальной задачей.

Одним из возможных вариантов является получение ^{89}Zr в фотоядерных реакциях на ускорителях электронов, которые меньше по размерам, проще в обслуживании и дешевле по сравнению с ускорителями тяжёлых заряженных частиц. Нами были изучены фотоядерные реакции с образованием ^{89}Zr при граничных энергиях тормозного излучения 20 и 55 МэВ.

Эксперимент по облучению пучком тормозных фотонов с максимальной энергией 55 МэВ проводился на импульсном микротроне НИИЯФ МГУ. Средний ток пучка электронов составлял 40–45 нА, размер пучка на мишени равнялся 8 мм × 2 мм. Тормозная мишень состояла из вольфрама толщиной 2,1 мм. Облучалась стопка металлических фольг молибдена, ниобия и тантала (использовался для определения потока излучения через мишени).

Облучение мишени из природной смеси изотопов молибдена и молибденовой мишени, обогащённой по изотопу с массовым номером 94, проводилось на линейном ускорителе электронов Varian Trilogy в режиме максимальной энергии пучка 20 МэВ. Однородное поле излучения формировалось системой выравнивающих фильтров и многолепестковым коллиматором и составляло 10 см × 10 см на уровне облучаемых мишеней.

В обоих экспериментах спектры гамма-излучения облученных образцов измерялись полупроводниковыми спектрометрами с детекторами из сверхчистого германия большого объема с энергетическим разрешением 1,8 кэВ на линии 1332 кэВ (^{60}Co). Абсолютная эффективность спектрометра определялась по линиям гамма-излучения от калибровочных источников ^{152}Eu и ^{226}Ra . Калибровочные источники имели те же размеры, что и облучаемые образцы.

Для определения интегрального потока тормозного излучения использовались реакции $^{181}\text{Ta}(\gamma, n)^{180}\text{Ta}$, $^{93}\text{Nb}(\gamma, n)^{92}\text{Nb}$ и $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$. Их сечения были взяты из литературы. Спектр тормозного излучения был смоделирован с использованием пакета программ GEANT4.

Результаты облучения на микротроне позволяют сделать заключение о том, что при облучении ниобия ^{89}Zr образовался из ^{93}Nb в $(\gamma, 4n) + (\gamma, p3n)$ -реакциях. Его выход составил 3,6 мбн×МэВ. В мишени из природного молибдена ^{89}Zr был получен в реакциях $^{92}\text{Mo}(\gamma, 3n) + (\gamma, p2n)^{89}\text{Nb}$ – ^{89}Zr и $^{94}\text{Mo}(\gamma, \alpha n)^{89}\text{Zr}$. Выход ^{89}Zr составил 2,2 мбн×МэВ.

Для оценки вклада изотопной примеси ^{88}Zr в получаемый ^{89}Zr были проведены исследования ниобиевых мишеней спустя полгода после активации. На спектре был виден незначительный выход ^{88}Y , дочернего изотопа ^{88}Zr . После перерасчетов с учетом периодов полураспада этих изотопов было получено, что вклад ^{88}Zr в активность мишени облученного ниобия составляет менее 10^{-3} от активности ^{89}Zr , а природного молибдена менее 10^{-4} . Из наших данных можно оценить, что при облучении 1 г естественного ниобия током 1 мкА в течение 1 часа образуется 300 кБк ^{89}Zr (активности ^{89}Zr , применяемые для медицинской визуализации, составляют 37 – 185 МБк).

При облучении молибдена излучением с граничной энергией 20 МэВ ожидалось, что, согласно статистической модели, реакция $^{94}\text{Mo}(\gamma, \alpha n)^{89}\text{Zr}$ будет сильно подавлена, так как её энергетический порог составляет 24 МэВ, из которых 13 МэВ – кулоновский барьер. Наличие в спектрах ^{89}Zr показало, что для граничных энергий тормозного излучения меньше 20 МэВ фотоядерные реакции с вылетом заряженных частиц проходят через механизм прямых реакций, что приводит к уменьшению порога реакции на 10–20 МэВ, так как в прямых реакциях влиянием кулоновского барьера можно пренебречь. Результаты эксперимента позволяют сделать оценку, что в подобных условиях при облучении мишени ^{94}Mo массой около 10 г и током 0,1 мА в течение одного периода полураспада может нарабатываться активность ^{89}Zr порядка 10^{11} Бк.

Дальнейшие эксперименты по облучению циркония, ниобия и молибдена тормозным спектром 20 МэВ свидетельствуют о связи сечения фотоядерной реакции и заполненности ядерной оболочки. $^{90}\text{Zr}(\gamma, \alpha n)^{85}\text{Sr}$: 0.030 ± 0.015 мбн; $^{96}\text{Zr}(\gamma, \alpha n)^{91}\text{Sr}$: 0.15 ± 0.05 мбн; $^{93}\text{Nb}(\gamma, \alpha n)^{88}\text{Y}$: 1.16 ± 0.12 мбн; $^{93}\text{Nb}(\gamma, \alpha n)^{88}\text{Y}$: 0.97 ± 0.10 мбн; $^{94}\text{Mo}(\gamma, \alpha n)^{89}\text{Zr}$: 1.04 ± 0.09 мбн; $^{100}\text{Mo}(\gamma, \alpha n)^{95}\text{Zr}$: 0.03 ± 0.01 мбн; $^{92}\text{Mo}(\gamma, \alpha)^{88}\text{Zr}$: 0.081 ± 0.009 мб. Результаты обсуждаются.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта N 20-315-90124. Исследование выполнено в рамках Программы развития Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

1. van Dongen G. и др. Immuno-PET: A Navigator in Monoclonal Antibody Development and Applications // The Oncologist. 2007. Т. 12. № 12. С. 1379-1389.
2. Reddy S., Robinson M. Immuno-Positron Emission Tomography in Cancer Models // Seminars in Nuclear Medicine. 2010. Т. 40. № 3. С. 182-189.
3. Cascini G. и др. ^{124}I iodine: A Longer-Life Positron Emitter Isotope—New Opportunities in Molecular Imaging // BioMed Research International. 2014. Т. 2014. С. 1-7.

Development of precise methods for uranium isotope analysis

M.V. Remizov¹, E. V. Platigina², I.A. Mitropolsky¹, V.G. Zinoviev¹, V.T. Lebedev¹

¹*Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov, NRC "Kurchatov Institute",
Gatchina, Leningrad distr., St.Petersburg*

²*Saint-Petersburg Technological University, St.Petersburg*

Among numerous applications of nuclear technologies, the methods of isotopes identification and separation play a crucial role in modern industries including power plants, various nuclear installations and the applications in nuclear medicine and pharmaceuticals. A precise determination of isotopic content is especially needed in medicines. Since nuclear technologies are based mainly on nuclear reactors [1], the related tasks are associated mostly with monitoring the isotopic composition of uranium-containing materials during their production, storage and use. Russian Federation adopted the "System of accounting and control of nuclear materials" [2] for determining ²³⁵U and other isotopes in uranium products. While there are many ways to evaluate the fractions of uranium isotopes, however, major method of non-destructive analysis [3] is based on gamma spectrometry registering the radiation spectrum of the sample to find its isotopic composition. Existing methods for isotopic analysis were designed for concrete experimental regimes only and do not allow extend the researches with a wide variation of tasks [4]. In this regard, PNPI has begun to develop a universal methodology for nuclear fuel accounting and control as well as for examining nuclear materials. In general, most relevant applications of this flexibly methodology can be realized in the field of technologies of medical isotopes in the field of targeted α therapy with Ac-225, Th-227, U-230, Th-226, Bi-213 (daughter of Ac-225) [5]. Along with isotopes identification and separation, their isolation in firm carbon cages (fullerenes) is following prospective way to create safety preparations with minimal risks of isotopes release to biological tissues by medical procedures. Indeed, uranium atoms form endofullerenes such as U@C₂₈ and with larger cages which are stabilized by endohedral heavy atom [6] that promises future applications of such nanostructures in biomedicine.

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Researches (gr. No 18-29-19008).

1. Nuclear Technology Review 2020. GC(64)/INF/2. Printed by the IAEA in Austria September 2020. IAEA/NTR/2020. 67 p.
2. OST 95 10560-2001 System of state accounting and control of nuclear materials. Physical inventory of nuclear materials. Moscow: Standartinform, 2017. 20 p.
3. Reilly D., Ensslin N. and Smith H.Jr. Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials. U.S. Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC 20555, NRC FIN A724, 1991. 700 p.
4. Gorbunova A.Yu. Rogozhkin V.Yu. Methodology for researching the metrological characteristics of MGAU/MGA - a method for measuring the isotopic composition of plutonium and uranium. Moscow: A.A. Bochvar high-tech research institute of inorganic materials. 2010. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=21974818> (дата обращения: 9.09.2021).
5. Birnbaum, E. R., Fassbender, M. E., Ferrier, M. G., John, K. D. & Mastren, T. Actinides in Medicine. in Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry 1–21 (John Wiley & Sons, Ltd, 2018). doi:10.1002/9781119951438.eibc2563.
6. T. Guo, M.D. Diener, Y. Chai, M.J. Alford, R.E. Haufler, S.M. McClure, T. Ohno, J.H. Weaver, G.E. Scuseria, R.E. Smalley. Uranium stabilization of C₂₈-A tetravalent fullerenes. Science, Vol. 257, pp. 1661-1664, 1992. doi: 10.1126/science.257.5077.1661

Разработка секции предускорителя-группирователя для нерелятивистского пучка

К. А. Гришина

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

Во многих областях науки и промышленности применяются линейные ускорители. Например, для конверсии частиц, в радиографических исследованиях и для получения изотопов. Для решения этих задач необходимо высокое токопрохождение для обеспечения большого тока пучка [1]. Таким образом, является актуальной задачей захват в режим ускорения непрерывного нерелятивистского пучка, который поступает из источника электронов. В этом случае необходимо устройство, которое позволит преобразовать непрерывный пучок из источника электронов в отдельные сгустки с частотой последующих ускоряющих структур и увеличить их энергию до релятивистских значений. Такой пучок можно инжектировать в регулярные ускоряющие структуры, предназначенные для релятивистских частиц, с высоким коэффициентом захвата в режим ускорения.

Цель работы заключается в разработке макета системы для группировки и ускорения непрерывного пучка с начальной энергией 15 кэВ до энергии порядка 1 МэВ с целью повышения коэффициента захвата частиц в регулярной ускоряющей структуре с частотой 2856 МГц. Отдельное внимание уделено системе настройки данного группирователя. Это связано с необходимостью работы на определенной моде при многомодовой конструкции структуры [2].

В результате работы готова секция предускорителя-группирователя и определены основные параметры тестового макета. Проведена работа по подбору полей группирователя, посчитана продольная динамика с учетом полученного поля. Изготовлены элементы ускоряющей структуры (ускоряющие ячейки, трансформатор типа волны, фланцы, система охлаждения), собран экспериментальный стенд и получено фактическое распределение поля в предускорителе-группирователе, сделана подстройка амплитуд поля в ячейках группирователя.

Расчеты показали, что группирователь способен обеспечить необходимые параметры пучка для дальнейшего ввода в регулярную ускоряющую секцию с коэффициентом захвата в режим ускорения более 80%.

1. Гришина К. А. и др. Анализ регулярных ускоряющих структур линейного ускорителя инжектора сибирского кольцевого источника фотонов // Письма в ЭЧАЯ. –2020. – Т. 17. – №. 1. – С. 49 – 62.
2. Левичев А.Е., Павлов В.М. Линейные СВЧ ускорители: электродинамика ускоряющих структур. Учебное пособие//Н.: ИЯФ_НГТУ, 2014. – 158 с.

Прецизионные измерения β -спектра ^{210}Bi

*И.Е. Алексеев¹, С.В. Бахланов², А.В. Дербин², И.С. Драчнев²,
И.М. Котина², И.С. Ломская², М.С. Микулич², В.Н. Муратова²,
Н.В. Ниязова², Д.А. Семенов², М.В. Трушин², Е.В. Унжаков²*

¹*Радиевый институт им. В.Г. Хлопина, Санкт-Петербург, Россия*

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

Прецизионные измерения β -спектров, в настоящее время, очень важны для поиска явлений за пределами Стандартной модели в области низких энергий. Точное знание формы β -спектров востребовано во многих областях фундаментальной физики, в первую очередь, в физике нейтрино.

Прецизионное измерение β -спектра ^{210}Bi является необходимым условием для корректного моделирования фона современных детекторов нейтрино и детекторов для поиска частиц темной материи. В частности, форма β -спектра ^{210}Bi аналогична форме спектра электронов отдачи, возникающих при рассеянии солнечных CNO-нейтрино, поэтому для выделения сигнала CNO-нейтрино необходимо знать форму β -спектра с достаточной точностью.

В данной работе представлены результаты измерения β -спектра ^{210}Bi , полученные с помощью двух спектрометров на основе Si(Li)-детекторов [1, 2]. Использовался спектрометр со стандартной геометрией "мишень - детектор" и новый спектрометр, состоящий из двух Si(Li)-детекторов и обладающий 4π -геометрией. Измеренный спектр описывался в виде, учитывающем влияние функции Ферми, отвечающей за электромагнитное взаимодействие вылетающего электрона с ядром и атомной оболочкой, и ядерный форм-фактор. В результате анализа экспериментальных спектров методом максимального правдоподобия были определены параметры ядерного форм-фактора в виде $C(W) = 1 + (-0.4470 \pm 0.0013)W + (-0.4470 \pm 0.0013)W^2$. Определенная таким образом функция форм-фактора согласуется с предшествующими исследованиями [3], но имеет значительно более высокую точность.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-02-00097 и № 20-02-00571) и Российского Научного Фонда (№№21-12-00063).

1. N. V. Bazlov, S. V. Bakhlanov, A. V. Derbin, I. S. Drachnev, V. K. Eremin, I. M. Kotina, V. N. Muratova, N. V. Pilipenko, D. A. Semyonov, E. V. Unzhakov, and E. A. Chmel. A beta spectrometer based on silicon detectors. *Instruments and Experimental Techniques*, 61:323 – 327, 2018. ISSN 0168-9002. doi:10.1134/S002044121803017X
2. I.E. Alekseev, S.V. Bakhlanov, A.V. Derbin, I.S. Drachnev, I.M. Kotina, I.S. Lomskaya, V.N. Muratova, N.V. Niyazova, D.A. Semenov, M.V. Trushin, E.V. Unzhakov. (2020). Precision measurement of the ^{210}Bi β -spectrum. *Physical Review C*, 102(6), 064329
3. H. Daniel. Das β -spektrum des RaE. *Nuclear Physics*, 31:293 – 307, 1962. ISSN 0029-5582. [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(62\)90745-9](https://doi.org/10.1016/0029-5582(62)90745-9)

Диффузионный натекаТЕЛЬ кислорода. Применение в источниках СИ

Б.Ю. Деев^{1,2}, Р.Г. Чумаков¹, К.А. Меньшиков¹, В.Г. Станкевич¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва

Под действием яркого рентгеновского излучения на оптических элементах каналов вывода синхротронного излучения образуется углеродная пленка, которая ухудшает их отражательные способности и спектральные характеристики.

Для решения этой проблемы была разработана система *in-situ* очистки рентгено-оптических элементов от углеродного загрязнения [1]. В основе данной системы лежит разработанный диффузионный натекаТЕЛЬ кислорода, основанный на принципе избирательного пропускания кислорода серебром, создающий контролируемое давление молекулярного кислорода в вакуумной камере оптического элемента. Под действием ионизирующего синхротронного излучения кислород взаимодействует с углеродным загрязнением, что приводит к образованию СО и СО₂ газов, которые откачиваются штатными вакуумными наносами.

В рамках проведенного исследования диффузионный натекаТЕЛЬ был установлен на канал вывода синхротронного излучения станции «НаноФЭС» [2], продемонстрировано его избирательное пропускание кислорода, возможность прецизионного изменения давления кислорода в диапазоне от $1 \cdot 10^{-11}$ до $1 \cdot 10^{-7}$ мбар, повышение давления паров СО и СО₂ под действием синхротронного излучения и изменение спектральных характеристик каналов вывода синхротронного излучения.

1. Toyoshima A. et al. In situ removal of carbon contamination from optics in a vacuum ultraviolet and soft X-ray undulator beamline using oxygen activated by zeroth-order synchrotron radiation // J. Synchrotron Radiat. 2012. Т. 19. № 5. С. 722–727.
2. Лебедев А. М. и др. Фотоэлектронный канал “НаноФЭС” Курчатовского источника синхротронного излучения // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2021. № 10. С. 44–49.

Использование борных выгорающих поглотителей в реакторе ПИК

Н.С. Жихарева¹, М.С. Онегин¹

¹ФБГУ «ПИЯФ им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

В работе исследовалось влияние выгорающего поглотителя на темп падения реактивности реактора ПИК. Геометрия активной зоны позволяет разместить во внутреннем периметре – шесть 6-гранных ТВС, во внешнем периметре – шесть 4-гранных и шесть 6-гранных ТВС. Шестигранная ТВС содержит 241 твэл, а четырехгранная - 161. Твэлы реактора ПИК имеют крестообразное сечение. [1] В качестве топлива использовался UO_2 с добавлением Cu и 0,6% Be . Содержание ^{235}U в одном твэле 8,57 грамм. В шестигранной ТВС расположено 6 вытеснителей или стержней выгорающего поглотителя, а в четырехгранной – 14 или 2 стержня вытеснителя и 12 стержней выгорающего поглотителя. СВП представляют собой полуцилиндры в оболочке из стального сплава ЭИ-847. 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 барн и 254000 барн, соответственно. Общее содержание гадолиния в одном СВП 0,7 грамм. Оболочка ТВС выполнена из стали 12X18H10T.

Реактивность в начале кампании без использования выгорающих поглотителей составляет $13,78\pm 0,05\%$. Расчет коэффициента размножения показал, что использование выгорающего поглотителя снижает реактивность в начале кампании на $2,60\pm 0,05\%$. В начале кампании избыточная реактивность $11,18\pm 0,07\%$. Эффективности гафниевых шторок (6-8%) не хватает для компенсации начальной избыточной реактивности.

Для уменьшения реактивности в начале кампании реактора рассматривается использование борного выгорающего (с природным обогащением по ^{10}B) поглотителя в виде циркониевого сплава, который расположен в шестигранных ТВС. Площадь поперечного сечения стержня $18,62\text{ мм}^2$.

Рассмотрены варианты использования трех стержней (концентрация бора 20%), шести стержней (концентрация бора 5%) и девяти стержней (концентрация бора 2%). Использование борных стержней снижает время кампании реактора примерно в 2 раза, поэтому нужно осуществлять режим частичных перегрузок во время эксплуатации реактора.

Рассматривается два вида перестановок:

1. «От центра». Выгоревшие за кампанию шестигранные ТВС внутреннего диаметра переставляются на место шестигранных ТВС внешнего диаметра, а на их место ставятся ТВС со свежим топливом. Три из шести четырехгранных ТВС также заменяются на ТВС со свежим топливом.

2. «К центру». Выгоревшие за кампанию шестигранные ТВС внешнего диаметра переставляются на место шестигранных ТВС внутреннего диаметра, а на их место ставятся ТВС со свежим топливом. Три из шести четырехгранных ТВС также заменяются на ТВС со свежим топливом.

Для трех стержней при перестановках «от центра» получен шаг цикла 20 дней, а при перестановке «к центру» 19 дней. Для шести стержней при перестановках «от центра» получен шаг цикла 20 дней и при перестановке «к центру» 20 дней. Для девяти стержней при перестановках «от центра» получен шаг цикла 21 дней и при перестановке «к центру» 21 дней.

1. Физическая модель реактора ПИК-2009. Часть I. Описание критических экспериментов / А.Н. Ерыкалов, А. С. Захаров, К. А. Коноплев, М. С. Онегин, С.Л. Смольский, П. А. Сушков. Гатчина: Препринт ПИЯФ-2823, 2009.

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

Моделирование разогрева отработавшей ТВС РБМК при транспортных операциях в центральном зале

А.М. Федосов, А.М. Осипов, С.В. Прохоренков

НИЦ “Курчатовский Институт”, Москва

Выгрузка отработавшей тепловыделяющей сборки (ТВС) на реакторах РБМК осуществляется с помощью разгрузочно-загрузочной машины (РЗМ) в водной среде, что обеспечивает надежный теплоотвод остаточного энерговыделения. Однако в некоторых случаях возможна выгрузка ТВС с помощью крана центрального зала. В этом случае ТВС будет нагреваться, поскольку теплоотвод осуществляется только за счет излучения и естественной конвекции воздуха. Для расчета температур элементов ТВС может быть использована модификация программы TRANS [1], предназначенная для моделирования тепловых режимов одиночных ТВС.

Целью работы являлось тестирование данной модификации программы TRANS путем сравнения с результатами экспериментов.

В 1983 году на 1-ом энергоблоке Курской АЭС проводилось изучение температурных режимов облученных ТВС при их транспортировке краном в центральном зале. Результаты измерений приведены в отчете [2]. Для измерений использовалась термометрическая кассета.

Термометрическая кассета РБМК, использованная в данных измерениях, загруженная в канал 51-54 1-го энергоблока Курской АЭС в 1977 году, имела термометрический твэл в нижнем пучке. Рабочий спай термоэлектрического преобразователя (ТЭП) располагался на расстоянии 2,33 м от низа активной зоны. Кроме того, ТЭП находился во внутренней полости центральной трубы с расположением рабочего спая на расстоянии 2,23 м от низа. Погрешность измерений температуры равна $\pm 2^\circ\text{C}$.

Измерения разогрева ТВС в сухом перегрузочном канале были проведены 03.04.1983. К этому моменту статочная мощность ТВС снизилась до 3,12 кВт. Результаты измерений температуры центральной трубы на временном интервале до 100 мин.

Моделирование температурных режимов ТВС в сухом пенале и без пенала проводилось по специальной версии программы TRANS. Рассматривалась двумерная (R-Z) модель ТВС в пенале (или без пенала). В радиальном направлении рассматривались центральная трубка, первый и второй ряд твэлов и пенал. В высотном направлении ТВС была разбита на 20 нод. Температура на поверхности твэлов в каждой из нод усреднялась (отдельно по каждому ряду).

При описании теплопередачи излучением угловые коэффициенты облученности представлялись в виде произведения коэффициентов в радиальном и аксиальном направлении. В аксиальном направлении использовался метод «натянутых нитей» [3]. В радиальном направлении взаимная облученность цилиндров (твэлов) рассчитывалась по формулам из [4]. Коэффициенты облученности «через ряд» оценивались по методу «натянутых нитей». Кроме того, использовалось условие для угловых коэффициентов замкнутой системы тел. Для каждого из рядов твэлов при определении угловых коэффициентов всего ряда «самого на себя» учитывались два соседних твэла и два твэла через ряд.

При моделировании ТВС РБМК в пенале рассматриваются четыре элемента: центральная труба, первый и второй ряды твэлов и внутренняя поверхность пенала.

Внутри пенала с ТВС конвекции практически нет. Поэтому теплопередача осуществляется в основном излучением, а также теплопроводностью через воздух. Однако теплоотдача от пенала осуществляется как излучением к стенам центрального зала, так и конвекцией воздуха вблизи внешней поверхности пенала. Для варианта ТВС без пенала теплоотдача излучением осуществляется в основном от внешнего ряда твэлов. При определении скорости естественной конвекции внутри ТВС итерационно решается задача уравнивания перепада давления, вызванного расширением нагретого воздуха, потерями на трение при движении воздуха в вертикальном направлении. При этом предполагается, что скорость движения воздуха в горизонтальном направлении много меньше скорости его движения в вертикальном направлении, т.е. рассматривается единый поток воздуха в вертикальном направлении. Температура на входе снизу ТВС равна температуре воздуха в центральном зале.

В расчетах предполагалось, что степень черноты окисленных поверхностей твэлов и центральной трубки 0,8. Степень черноты поверхности стен центрального зала также принята равной 0,8. Распределение остаточного энерговыделения по высоте ТВС не учитывалось.

Варьирование исходных данных показывает, что основную роль играет степень черноты поверхностей ТВС. Максимальное отклонение расчета от эксперимента для центральной трубки не превышает 10°C .

При наличии конвекции стабилизация температуры происходит значительно быстрее (примерно к 60-ой минуте) максимальное отклонение результатов расчетов от результатов измерений составляет 6°C .

Результаты моделирования показывают, что использованная модификация программы TRANS адекватно описывает изменение температур ТВС, транспортируемых по воздуху в центральном зале РБМК.

1. Программа расчета температурного режима обезвоженного бассейна выдержки РБМК «TRANS». Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018662639, 12.10.2018 г.
2. Обоснование критериев безопасного обезвоживания топливных каналов при ремонте. – Отчет НИКИЭТ, 4.91 От, 1-00.05-03-01.86-1960К 040-247, рег. № Л-538/040, 1987 г.
3. Крейт Ф., Блэк У. Основы теплопередачи. – М.: Мир, 1983.
4. Кутателадзе С.С., Боришанский В.М. Справочник по теплопередаче. М: Госэнергоиздат, 1958
5. Расчетные соотношения и методики расчета гидродинамических и тепловых характеристик элементов и оборудования водоохлаждаемых ядерных энергетических установок. РБ-040-09. М: Гостехнадзор, 2009.

Программа для расчета выходов радионуклидов из топлива при авариях CHAIN-2

А.К. Смирнова, А.В. Краюшкин

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Программное средство CHAIN-2 предназначено для моделирования изменения нуклидного состава материалов при облучении нейтронами и в процессе радиоактивного распада входящих в их состав нестабильных ядер. Программа использует точечную модель с условиями однородности свойств среды и плотности потока нейтронов в рассматриваемом объеме. Программа была модернизирована в части оценки выхода радионуклидов из топливной матрицы. Результаты расчета ядерных концентраций основных дозообразующих нуклидов в облученном топливе по необходимости используются отдельным блоком программы для данных расчетов.

Для расчета выхода радионуклидов из топлива рассматривается фрагмент диоксида урана цилиндрической формы. Радионуклиды генерируются в объеме фрагмента и диффундируют к поверхности. Несмотря на сложность процесса выхода радионуклидов довольно давно было предложено использовать для описания выхода уравнение диффузии внутри топливной таблетки [1]. Уравнение диффузии решается в двумерной r-z геометрии конечно-разностным методом с нулевым граничным условием на торцах и боковой поверхности цилиндрического объема (включая центральное отверстие в таблетке, если оно есть) и нулевым начальным условием. В уравнение включены полуэмпирические коэффициенты, одинаковые для летучих радионуклидов и благородных газов [2]. Коэффициенты диффузии для средне- и слаболетучих продуктов деления (например, барий, рутений) берутся разные для разных радионуклидов. Данные коэффициенты были получены и верифицированы отдельно на различных экспериментах. Использование полуэмпирических коэффициентов позволяет модели не учитывать ряд сложных взаимодействий радионуклидов на пути их выхода из топлива.

Расчетная модель учитывает выход радионуклидов через геометрические поверхности таблетки и через пористость, а также учитывает атмосферу среды (окислительная, восстановительная, смешанная), в которую выходит радионуклид, что особенно важно для средне- и слаболетучих продуктов деления.

На основании проведенных сравнений с данными экспериментов и расчетов по другим (в том числе аттестованным) программам был сделан вывод, что максимальная погрешность не превышает 100%.

1. Rest J., Cooper M.W.D., J. Spino, J.A. Turnbull, P. van Uffelen, C.T. Walker. Fission gas release from UO₂ nuclear fuel: A review. *Journal of nuclear materials* 513 (2019), p. 310-345.
2. Turnbull J.A., Beyer C.E. Background and Derivation of ANS-5.4 standard Fission Product Release Model, NUREG/CR7003 PNNL-18490.

Анализ возможности возникновения повторной критичности в ходе тяжелой аварии на реакторах РБМК

А.В. Краюшкин, А.К. Смирнова, И.А. Тупошилов

НИИЦ “Курчатовский Институт”, Москва, 123182

Основной тенденцией развития общества в XXI веке является непрерывный рост энергопотребления, связанный как с ростом народонаселения, так и с удовлетворением потребности в энергии стран третьего мира, что необходимо для их развития. Глобальное потребление энергии, по всей видимости, удвоится к середине века, даже если исходить из очень низких темпов роста. Данный рост зависит от развития мировой экономики, роста населения и стремления к более равномерному распределению потребления энергии по регионам мира [1].

Авария в США на атомной электростанции (АЭС) Три Майл Айленд резко замедлила развитие атомной энергетики на Западе, а после Чернобыльской аварии для атомной энергетики наступила черная полоса и в России. Для продолжения эксплуатации имеющихся ядерных установок были развернуты масштабные исследования в области безопасности [2]. Авария на АЭС Фукусима в 2011 году вызвала новый виток интереса к исследованию тяжелых аварий, которые, например, применительно к АЭС с РБМК ранее практически не рассматривались. Тяжелой аварией называется инцидент на АЭС, при котором произошло нарушение барьеров безопасности с повреждением активной зоны и выбросом в окружающую среду большого количества радиоактивных продуктов, накопленных в активной зоне. Исходя из этого, математическое моделирование тяжелых аварий является одним из центральных вопросов при организации безопасности на атомных объектах.

Особый интерес представляет авария с полным обесточиванием энергоблока. В этой аварии реактор достаточно надежно заглушается. Однако в дальнейшем из-за роста температур в активной зоне возможно разрушение поглощающих стержней и изменения конфигурации расположения топлива, что может приводить к существенному изменению реактивности. Возможные действия по ослаблению последствий аварии в совокупности с упомянутыми разрушениями могут оказать существенное влияние на реактивность и вызвать возникновение повторной критичности, которая может значительно усугубить последствия.

Задача о повторной критичности применительно к реактору РБМК требует особого внимания.

Моделирование данной аварии производилось с помощью программы разработанной для расчета разогрева обезвоженного РБМК – STEPAN-T, которая в данный момент проходит аттестацию. Программа на основе расчета температур в активной зоне и окружающих реактор конструкциях позволяет предсказать последовательность разрушений элементов реактора в ходе аварии. С учетом температур и изменений конфигурации топлива и поглотителей определяется подкритичность в функции времени с момента начала аварии. Расчет ведётся в 3-х мерной геометрии, что представляется важным для корректных оценок подкритичности. Были получены распределения температур по активной зоне и окружающих её металлоконструкций. Получены зависимости реактивности от температуры графита, показано влияние эрбия и выхода продуктов деления на величину подкритичности. Основные выводы из проведенных исследований заключаются в следующем:

- При развитии аварии без управляющих воздействий повторная критичность не возникает.
- При попытках охлаждения реактора, разогретого до температур более 1450 °С, повторная критичность может быть получена.

1. Самойлов О. Б., Усынин Г. Б., Бахметьев А. М. Безопасность ядерных энергетических установок. — М.: Энергоатомиздат, 1989. — 280 с.
2. Филимонов П.Е. Исследование повторной критичности при тяжелых авариях // Атомная энергия. - Т.75. - №1. 1993. - С. 71-73.

Измерение константы жесткости спиновых волн и энергетической щели в спектре магнонов аморфных ферромагнетиков методом малоуглового рассеяния нейтронов

Л. А. Азарова^{1,2*}, К. А. Пшеничный², А. Хайнеманн³, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ “Курчатовский институт”, 188300 Гатчина, Россия

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, 21502 Geesthacht, Germany

Аморфные магнитные материалы представляют значительный интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. Низкое коэрцитивное поле в аморфном магнетике является важным свойством для его применения в качестве материала сердечника в электрических трансформаторах. Структурные и магнитные свойства аморфных магнитных систем могут быть достаточно сложными. Наличие структурного, а также магнитного беспорядка играет важную роль в аморфных системах. Однако понимание формирования и роста спиновых кластеров в аморфных системах является сложной задачей. Свойства спиновых кластеров в аморфной системе под действием внешнего магнитного поля зависят от их морфологии. Поэтому с точки зрения магнетизма интересными аспектами являются: (1) корреляция между структурными и магнитными свойствами; (2) понимание поведения спиновых кластеров и (3) исследование магнитных возбуждений в таких системах.

В данной работе представлены исследования магнитных возбуждений аморфных ферромагнитных сплавов FeNi методом малоуглового рассеяния нейтронов. Широко известно, что наиболее прямым способом исследования магнитных возбуждений являются методы трехосной и времяпролетной спектроскопии. Однако у обоих этих методов есть ограничение – невозможность проводить измерения вблизи прямого пучка, т.е. для малых переданных импульсов. Поэтому была предложена и внедрена в Петербургском институте ядерной физики в середине восьмидесятых годов методика малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов в наклонной геометрии [1]. Измеряя разницу в зависимости интенсивностей рассеяния при различной начальной поляризации пучка нейтронов от переданного импульса, можно зарегистрировать рассеяние на спиновых волнах. В этом случае используется киральный канал рассеяния поляризованных нейтронов, позволяющий измерять асимметрию интенсивности рассеяния, которая проявляется наилучшим образом при приложении внешнего магнитного поля под углом в 45° [2]. В этом случае оказывается, что рассеяние на спиновых волнах сконцентрировано в конусе, ограниченном углом отсечки θ_c (Рис.1). Таким образом, получая зависимость угла отсечки от приложенного магнитного поля или от длины волны нейтронов, можно определить жесткость спиновых волн.

В данной работе были получены зависимости интенсивности рассеяния поляризованных нейтронов на спиновых волнах от приложенного внешнего магнитного поля H и от длины волны нейтронов λ на образцах аморфных сплавов FeNi. По результатам проведенных исследований показано, что спектр спиновых волн является не просто квадратичным по переданному импульсу, а в нем присутствует дополнительная добавка в виде щели E_g неполевой природы $\varepsilon = Aq^2 + g_{\text{eff}}H + E_g$. Наличие щели, не зависящей от поля, в спектре аморфных ферромагнетиков уже было ранее обнаружено в аморфных микропроводах соединения Fe_{77.5}Si_{5.5}B₁₅ [3]. В представляемой работе также показано, что, только измеряя одновременно две зависимости угла отсечки: от приложенного магнитного поля и от длины волны, можно получить достоверную информацию о спиновой динамике в системе методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

1. A.I. Okorokov, V.V. Runov, B.P. Toperverg, A.D. Tretyakov, E.I.Maltsev, I.M.Puzerii, V.E.Mikhailova, JETP Lett., 43, 503(1986).
2. С. В. Григорьев, Е. В. Алтынбаев, Н. Eckerlebe, А. И. Окорок, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 10, 71-78 (2014).
3. С. В. Григорьев, К.А.Пшеничный, И.А.Барабан, В. В. Родионова, К.А.Чичай, А.Хайнеманн, Письма в ЖЭТФ, 110, 800 – 806 (2019).

Изучение электронной структуры системы графен/Pt(111) в области точки Дирака при адсорбции атомов Na

А.А. Гозина¹, А.В. Тарасов¹, А.Г. Рыбкин¹, А.М. Шикин¹ и И.И. Климовских¹

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

В настоящее время графен продолжает привлекать значительный исследовательский интерес, обусловленный его большим потенциалом для практического применения в электронике и спинтронике [1, 2] ввиду наличия уникальной линейной дисперсии электронных π – состояний вблизи K – точки зоны Бриллюэна, именуемой конусом Дирака, которая может быть использована для реализации бездиссипативного электронного транспорта. Однако состояния свободного графена не обладают обменным и спин-орбитальным расщеплением, что препятствует его использованию в спинтронике. Приведение графена в контакт с металлами разной природы приводит к изменению его электронной и спиновой структуры. Например, в системе Gr/Pt сохраняется квазисвободный характер графена, при этом d – состояния платины гибридизуются с π – состояниями графена, приводя к их спин-орбитальному расщеплению и появлению асимметричной спиновой поляризации конуса Дирака. Таким образом, эта система может быть использована для создания спиновых фильтров на основе графена.

Так, например, в работе 2 описана возможность создания спин-поляризованных токов в системе графен/Pt(111), обусловленная индуцированием спин-орбитального расщепления (типа Рашба) π – состояний графена, вызванного его контактом с тяжёлыми атомами платины. Однако данная работа ограничивается экспериментальным исследованием Рашба – расщеплением исключительно заполненных состояний графена (некоторой части нижних ветвей конуса Дирака), поскольку графен в такой системе является p –допированным, а точка Дирака находится выше уровня Ферми.

При этом в более ранних теоретических работах для данной системы было предсказано появление топологической спин-орбитальной щели между двумя частями конуса Дирака 3. Кроме того, в работе 4 было предсказано, что графен принимает фазу топологического изолятора, если внутреннее спин-орбитальное взаимодействие в графене сильнее, чем связь Рашбы. Помимо этого, в такой системе может наблюдаться квантовый спиновый эффект Холла, а также образование топологических краевых состояний. Все эти эффекты требуют дальнейших детальных исследований. Однако, пока в системе графен/Pt(111) вершина конуса Дирака расположена выше уровня Ферми, не представляется возможным экспериментально подтвердить или опровергнуть данные теоретические предсказания. Более того, приведённые в работе 2 расчёты спиновой структуры вблизи точки Дирака показывают образование зазора между нижним и верхним конусами, вызванное спиновой гибридизацией, что также требует дальнейшего экспериментального исследования зон, относящихся к верхней части конуса.

Чтобы изучить состояния верхней части конуса Дирака и проверить возможность существования запрещённой зоны для системы графен/Pt(111), в нашей работе проводился n -допинг системы, обусловленный переносом заряда, путём адсорбции атомов Na на её поверхность. Для анализа электронной структуры нами проводились измерения дисперсионных зависимостей методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) при энергии фотонов 120 eV. С целью интерпретации экспериментальных ФЭСУР-спектров зонной структуры систем графен/Pt(111) и Na/графен/Pt(111) проводились теоретические расчёты в рамках метода теории функционала плотности (DFT). В качестве моделей были выбраны суперструктуры $Gr(2 \times 2)/Pt(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ для чистой системы и с адсорбированным Na. Как показано в работе 5, осаждение атомов и частичная интеркаляция Na на поверхность системы графен/Ir(111) приводит к сдвигу графеновых π – состояний в сторону больших энергий связи без существенных изменений формы конуса Дирака. В нашем случае при адсорбции Na на поверхность системы графен/Pt(111) точка Дирака сдвигается в сторону больших энергий связи в положение при ≈ 1.2 эВ, что открывает возможность увидеть изначально незаполненные состояния графена. Проведённые нами теоретические расчёты методом DFT показывают, что допинг, полученный в эксперименте, и поляризация конуса, вызванная спин-орбитой платины, возможны только в случае адсорбции Na на поверхность без его интеркаляции.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования (грант № 075-15-2020- 797 (13.1902.21.0024)).

1. W.Han, R.K.Kawakami, M.Gmitra, and J.Fabian, NatureNanotechn.9, 794(2014).
2. A. A. Rybkina, A. G. Rybkin, I. I. Klimovskikh et al., Nanotechnology31,16520 (2020).
3. Klimovskikh I. I. et al. Nontrivial spin structure of graphene on Pt (111) at the Fermi level due to spin-dependent hybridization //Physical Review B. – 2014. – Т. 90. – №. 23. – С. 235431.
4. Hu J. et al. Giant topological insulator gap in graphene with 5 d adatoms //Physical review letters. – 2012. – Т. 109. – №. 26. – С. 266801.
5. Kane C. L., Mele E. J. Quantum spin Hall effect in graphene //Physical review letters. – 2005. – Т. 95. – №. 22. – С. 226801.
6. Pervan P., Lazić P. Adsorbed or intercalated: Na on graphene/Ir (111) //Physical Review Materials. – 2017. – Т. 1. – №. 4. – С. 044202.

Модельное описание электронной структуры графена с индуцированными обменным и спин-орбитальным взаимодействиями

А. В. Ерыженков¹, А. В. Тарасов¹, А. А. Рыбкина¹, А. Г. Рыбкин¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Известно, что в материалах с нетривиальной топологией зонной структуры возможна та или иная форма бездиссипативного транспорта. Как правило, необходимым условием наличия нетривиальной топологии зонной структуры является значительное внутреннее спин-орбитальное взаимодействие (англ. *intrinsic spin-orbit coupling*).

В свободном графене при приложении сильного внешнего магнитного поля наблюдается квантовый эффект Холла, в том числе и при комнатной температуре [1]. При определённых условиях возможно успешное получение квантового спинового эффекта Холла [2] и считается возможным получение квантового аномального эффекта Холла [3]. Необходимым условием проявления обоих этих эффектов является нетривиальная топология зонной структуры, которая обычно наблюдается при условии достаточно сильного спин-орбитального взаимодействия. Однако собственное спин-орбитальное взаимодействие в свободном графене слишком мало (порядка 10 мкэВ), поэтому необходим некий способ индуцирования этого взаимодействия в графене.

Одним из таких способов является использование подложки из плёнок тяжёлых металлов, причём такой, на которой графен будет иметь квазисвободный характер. В подобных системах на межфазных границах графен—тяжёлый металл имеет место взаимодействие типа Рашбы, индуцированное тяжёлым металлом, которое по отношению к графену является внешним спин-орбитальным взаимодействием (англ. *extrinsic spin-orbit coupling*). Оно разрушает симметрию собственного кристаллического поля графена относительно отражения $z \rightarrow -z$, модифицирует характеры электронной и спиновой структур графена и может приводить к возникновению топологически нетривиальных фаз.

Экспериментальные проявления этих особенностей заключаются в расщеплении и спиновой поляризации ветвей конуса Дирака, причём в то время, как величины расщепления не зависят от долины (K или K^*), спиновая текстура дираковских электронов меняется на противоположную при переходе от одной долины к другой или при переходе через центр долины. Спин при наличии такого взаимодействия перестаёт быть хорошим квантовым числом и запрещённая зона при этом не открывается, хотя электроны вблизи точки Дирака, как правило, приобретают конечную эффективную массу.

Для наблюдения квантового аномального эффекта Холла в графене помимо индуцированного спин-орбитального взаимодействия требуется также и индуцированный магнетизм. К сожалению, прямой синтез графена на ферромагнитных подложках (например, Ni или Co) сопряжён с исчезновением линейного характера конуса Дирака в электронной структуре [4, 5]. При промежуточном введении золота с образованием систем Gr/Au/Ni и Gr/Au/Co в их зонной структуре наблюдается значительное спин-орбитальное расщепление [6, 7], причём, в отличие от случая чисто Рашба-взаимодействия, от долины зависит не только порядок спинов в спиновой структуре, но ещё и величина самого расщепления. Расчёты, проведённые в рамках ТФП [8], показывают, что подобные особенности электронной и спиновой структуры графена возникают при условии появления ненулевых коллинеарных магнитных моментов углеродных атомов с величиной, зависящей от подрешётки.

В данной работе представлена теоретическая модель сильной связи, построенная на использовании p_z -орбиталей графена, с гамильтонианом, включающим как член обменного взаимодействия в приближении среднего поля, так и Рашба-взаимодействие в виде члена, ранее представленного в литературе [9]. Полученная модель позволяет объяснить как причины проявления зонной структуры, получаемую в ТФП расчётах и SARPES измерениях, а именно ферромагнитный порядок магнитных моментов графена.

Тот факт, что данная модель достаточно точно воспроизводит электронную и спиновую структуру графена в столь сложной системе, делает возможным её использование для исследования топологических инвариантов (чисел Черна) этой системы методом из [10]. Кроме того, модель была использована для оценки магнитного порядка многоэлектронного основного состояния в зависимости от соотношения констант обменного и спин-орбитального взаимодействий.

Предполагается, что построенная модель является достаточно универсальным средством описания сложных явлений в системах с одновременным наличием магнетизма и спин-орбитального взаимодействия.

Данная работа выполнена благодаря финансовой поддержке РФФ (грант №18-12-00062).

1. K. S. Novoselov et al. // Science. - 2007. - V. 315, 5817.
2. C. K. Safeer et al. // Nano Lett. - 2019. - V. 19, 2. - P. 1074–1082.
3. Y. Han et al. // Sci. Rep. - 2015. - V. 5, 16843.
4. A. Varykhalov et al. // Phys. Rev. Lett. - 2008. - V. 101, 157601.
5. D. Usachov et al. // Nano Lett. - 2015. - V. 15, 4. - P. 2396–2401.
6. D. Marchenko et al. // Nat. Comm. - 2012. - V. 3, 1232.
7. A. G. Rybkin et al. // Nano Lett. - 2018. - V. 18, 3. - P. 1564–1574.
8. A. G. Rybkin et al. // *Sublattice ferrimagnetism in quasi-freestanding graphene*. to be published.
9. C. L. Kane, E. J. Mele. // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V. 95, 146802.
10. T. Fukui et al. // J. Phys. Soc. Jpn. - 2005. - V. 74. - P. 1674-1677.

Влияние дефектов на электронную структуру антиферромагнитного топологического изолятора $MnBi_2Te_4$

Д.А. Естюнин¹, И.И. Климовских¹, Н.Л. Зайцев², А.М. Шикин¹

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

²*Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН, Уфа, Россия*

Квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) позволяет реализовать квантовую спиновую проводимость без потерь даже при нулевом внешнем магнитном поле, тем самым представляя большой интерес для спинтроники и квантовых компьютеров [1]. Единственным на данный момент способом реализации данного эффекта является комбинация магнитных и топологических свойств в одном материале – магнитном топологическом изоляторе (ТИ) [2]. Обычный ТИ представляет собой объемный изолятор с топологически защищенными металлическими поверхностными состояниями [3]. Их защищенность происходит за счет наличия определенных симметрий в материале, в частности симметрии обращения времени, как в случае наиболее изучаемых ТИ Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 . Топологические поверхностные состояния (ТПС) в данных соединениях представляют собой один конуса Дирака вблизи уровня Ферми. ТПС сохраняют свою металличность при любых возмущениях, кроме магнитных, которые нарушают симметрию обращения времени. В результате в электронной структуре ТПС открывается запрещенная зона в точке пересечения ветвей конуса – в точке Дирака [4,5]. Если данная запрещенная зона располагается на уровне Ферми, то в материале могут появиться краевые проводящие состояния за счет КАЭХ [2].

Таким образом главной задачей для реализации данного эффекта является поиск и реализация материалов с сочетанием топологических и магнитных свойств. Структурные элементы ТИ являются тяжелые *sp*-металлы, такие как *Bi, Se, Te, Sb*. Таким образом магнетизм может быть создан при помощи легирования исходного ТИ магнитными металлами или при внешнем контакте ТИ с магнетиком [5]. Действительно было показано, что легирование ТИ $(Bi, Sb)_2Te_3$ атомами *Cr* или *V* позволяет наблюдать КАЭХ, однако при температурах не выше 1 К, хотя температура магнитного перехода и открытия запрещенной зоны в точке Дирака для данных материалов близка к 10-15 К [5]. Такое значительное различие температур объясняется наличием существенных неоднородностей кристаллической структуры магнитно-легированных ТИ, что приводит к значительной вариации величины энергетической щели по поверхности образца.

Подобный недостаток отсутствует в недавно представленном магнитном ТИ нового типа: собственный магнитно-упорядоченный антиферромагнитный (АФМ) ТИ со стехиометрией $MnBi_2Te_4$ [6,7]. Данный материал обладает однородным и упорядоченным расположением атомов магнитного металла (*Mn*), что способствует открытию большой энергетической щели в точке Дирака: до 85-88 мэВ, согласно теоретическим расчетам, и 60-70 мэВ, согласно экспериментальным исследованиям. Структура АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$ вдоль направления (0001) формируется из семислойных блоков (СБ), разделенных Ван-дер-Ваальсовыми промежутками, где каждый блок состоит из последовательности атомных слоев (Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te). Внутри каждого СБ атомы *Mn* связаны ферромагнитно. При этом взаимодействие между соседними СБ и соответствующими магнитными марганцевыми слоями имеет антиферромагнитный характер. Упорядоченная структура магнитных атомов в данном материале также приводит к высокой температуре Нееля, $T_N=24.5K$ (температуре объемного перехода из антиферромагнитного в парамагнитное состояние). Комбинация большой энергетической щели с высокой T_N (в сравнении с магнитно-легированными ТИ) позволяет наблюдать переход в состоянии КАЭХ при более высокой температуре.

Однако в последних работах [8,9] было показано, что величина энергетической щели в точке Дирака для $MnBi_2Te_4$ может существенно отличаться от теоретически предсказанной. В ряде работ была показана возможность «бесщелевой» дисперсии ТПС, измеренной для $MnBi_2Te_4$ методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР).

В данном докладе будут обсуждаться возможные причины подобных изменений электронной структуры $MnBi_2Te_4$ и их связь с дефектами кристаллической структуры. Будут представлены и проанализированы экспериментальные изменения в величине энергетической щели в точке Дирака, полученные методом ФЭСУР для различных образцов ТИ $MnBi_2Te_4$. При этом будут предложены основные факторы, которые могут обуславливать подобные изменения величины щели. Для выявления данных факторов будут использованы расчеты зонных структур $MnBi_2Te_4$ методом теории функционала плотности при приложении электрического поля перпендикулярно поверхности, которое моделирует изменение поверхностного градиента потенциала, или при изменении в величине спин-орбитального взаимодействия для поверхностных атомов *Te* и *Bi*.

Работа была выполнена в рамках финансовой поддержки Министерством Науки и Высшего образования РФ (грант No 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024))

1. M. Onoda, N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett., 90, 206601 (2003)
2. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al., Science 340, 167 (2013)
3. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010)
4. Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis et al., Science 329, 659 (2010)
5. Y. Tokura, K. Yasuda, A. Tsukazaki, Nat. Rev. Phys., 1, 126 (2019)
6. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., Nature 576, 416 (2019)
7. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., APL Mat. 8, 021105 (2020)
8. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al., Phys. Rev. X 9, 041038 (2019).
9. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al., Phys. Rev. X 9, 041040 (2019).

Теоретическая интерпретация образования асимметричных интерфейсов в многослойных структурах, синтезированных методом магнетронного напыления

А.В. Каратаев¹, А.У. Гайсин¹, А.В. Соломонов¹, Е.О. Филатова¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д.1, Петродворец, Санкт-Петербург, Россия

Исследования многослойных рентгеновских зеркал, синтезированных методом магнетронного напыления, указывают на то, что состав их межфазной границы существенно зависит от порядка нанесения слоев: как правило, формируются асимметричные слои одного состава, но разной протяженности [1] или разной протяженности и разной стехиометрии [2,3]. Так, например, нанесение слоя бериллия на молибден приводит к образованию бериллида, обогащенного Ве, близкого по составу к MoBe_{12} . В противоположном случае наблюдается образование бериллида, близкого к дибериллиду MoBe_2 .

Для объяснения возникающей асимметрии границ раздела был проведен теоретический анализ процесса обмена между атомами пленки и атомами подложки во время роста пленки. Формирование переходных слоев в результате перемешивания соседних слоев можно рассматривать как результат двух механизмов, возникающих при осаждении слоев: механического проникновения падающих атомов в слой и обмена позициями поверхностных и подповерхностных атомов, вызванного минимизацией поверхностной свободной энергии. Первый механизм вызван баллистическими столкновениями между падающими атомами и поверхностными атомами подложки и зависит от энергии падающего атома пленки, энергии связи, атомной массы, координационного числа и межатомного расстояния. Этот механизм особенно важен для методов осаждения с высокой энергией налетающих атомов (от единиц до десятков эВ).

Были выполнены расчеты энергии распыленных из мишени атомов и глубины их проникновения в подложку в процессе осаждения при использовании программного пакета Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) [4] для многослойных систем Mo/Si и Mo/Be без/с буферными слоями (B_4C и Si). Данная программа основана на приближении бинарных столкновений (BCA) и включает следующие приближения: мишень полностью аморфна, динамические изменения состава в материале не учитываются, рекомбинация выбитых атомов (междуузлий) с вакансиями не учитывается. Несмотря на ограничения, заложенные в программе, она позволяет установить основные факторы, влияющие на результирующую асимметрию межфазных зон в слоистых системах. Расчеты были проведены для различных значений энергии ионов аргона (от 50 эВ до 400 эВ).

Установлено, что глубина формирования интерфейса сопоставима с глубиной проникновения атомов при синтезе и слабо зависит от энергии ионов. Проанализировано влияние введения буферных слоев на формирование межфазной границы. Установлено, что стехиометрия бериллида, формирующегося на границе раздела в системе Mo/Be во время магнетронного распыления в основном определяется кинетической энергией падающих атомов. Результаты теоретических расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными нами ранее.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-72-20125.

1. Sakhonenkov, S., Filatova, E. O., Gaisin, A. U., Kasatnikov, S. A., Konashuk, A., Pleshkov, R. S., & Chkhalo, N. I. (2019). Angle resolved photoelectron spectroscopy as applied to X-ray mirrors: In depth study of Mo/Si multilayer systems. *Physical Chemistry Chemical Physics*.
2. Kasatnikov S.A. et al. Study of Interfaces of Mo/Be Multilayer Mirrors Using X-ray Photoelectron Spectroscopy // *J. Phys. Chem. C*. 2019. Vol. 123, № 42.
3. S.S. Sakhonenkov, E.O. Filatova, S.A. Kasatnikov, E.S. Fateeva, R.S. Pleshkov, V.N. Polkovnikov, Layer intermixing in ultrathin Cr/Be layered system and impact of barrier layers on interface region. *Applied Surface Science*, Volume 570, 2021, 151114, ISSN 0169-4332
4. Biersack J.P., Ziegler J.F. (1982) The Stopping and Range of Ions in Solids. In: Ryssel H., Glawischnig H. (eds) *Ion Implantation Techniques*. Springer Series in Electrophysics, vol 10.

Открытие новой фазы вещества — собственных магнитных топологических изоляторов — при помощи синхротронного излучения

И.И. Климовских, Д.Естюнин, С. Фильнов, А.Г. Рыбкин, А.М. Шикин

Санкт-Петербургский государственный университет 199034, Санкт-Петербург, Россия

В последние годы основным направлением развития физики конденсированного состояния является поиск и изучение новых типов материалов, характеризующихся уникальными электронными, оптическими, магнитными или механическими свойствами, которые описываются фундаментально новыми принципами. Так, недавно был открыт ряд “квантовых” материалов, в которых динамика электронов описывается релятивистским уравнением Дирака вместо классического уравнения Шредингера. При этом эффективная масса релятивистских фермионов может обращаться в ноль, приводя к формированию линейной дисперсии электронных состояний, так называемому конусу Дирака. Такие материалы могут быть применены в самых различных прикладных областях вследствие целого ряда эффектов, не присущих классической твердотельной электронике.

Наиболее интригующими и перспективными «Дираковскими» материалами являются топологические изоляторы (ТИ) [1]. Такие системы являются изоляторами в объеме, но на поверхности характеризуются металлическими топологическими спин-поляризованными состояниями, защищенными от внешних воздействий. При этом линейная дисперсия топологических поверхностных состояний образует конус Дирака, который имеет уникальную геликоидальную спиновую текстуру.

Особый интерес вызывают материалы, объединяющие нетривиальную топологию и магнетизм. До недавнего времени единственным способом создания магнитных топологических изоляторов было допирование ТИ атомами магнитных металлов. В этих соединениях магнитные атомы нарушают симметрию обращения времени, на поверхности открывается обменная щель в точке Дирака и реализуется квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) (с возможностью реализации ряда других эффектов, таких как магнитный монополю, фермионы Майорана и др.) [2]. Однако на данный момент температура перехода допированных соединений в фазу КАЭХ не превышает 2 К, при этом теоретические оценки не предполагают ее заметного повышения.

Для решения проблемы объединения магнетизма и топологии в данной работе применен принципиально иной подход. Сначала теоретически показана возможность существования топологических изоляторов, с упорядоченным расположением магнитных атомов. Затем такой материал был синтезирован, и авторами впервые показаны его уникальные магнитные и топологические свойства [3]. При помощи фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения подтверждена фаза собственного антиферромагнитного (АФМ) топологического изолятора в соединении MnBi_2Te_4 . Для этого изучены и проанализированы электронная и спиновая структуры данной системы, выявлено наличие конуса Дирака на поверхности (0001) и запрещенной зоны в точке Дирака. Также измерены магнитные характеристики, демонстрирующие антиферромагнитный тип упорядочения и температуру перехода 25 К. Данное открытие привело к формированию нового направления в области топологических изоляторов и к разработке десятков прототипов устройств на основе нового материала.

Помимо открытия фазы АФМ ТИ в MnBi_2Te_4 авторами экспериментально обнаружены фазы собственных магнитных ТИ в семействах $\text{MnBi}(2-x)\text{SbxTe}_4$ и $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$. [4] Изучение соединений различными методами позволило выявить зависимость магнитного порядка и структуры конуса Дирака от параметров x и m . Возможность управления топологическими и магнитными свойствами новых материалов открывает пути для их применения в двумерной и антиферромагнитной спинтронике, а также квантовых вычислениях.

Работа поддержана грантами Санкт-Петербургского государственного университета (ID No. 51126254, <https://spin.lab.spbu.ru>), Российского Научного Фонда (но. 18-12-00062) и Российского Фонда Фундаментальных исследований (но. 20-32-70179), а также грантом Министерства науки и высшего образования (No.075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

1. Hasan M. Z. and Kane C. L., Colloquium: Topological insulators // *Rev. Mod. Phys.* – 2010. – Vol. 82. – P.3045.
2. Tokura, Y., Yasuda, K. and Tsukazaki, A., Magnetic topological insulators // *Nat. Rev. Phys.* -2019. – Vol.1. - P. 126.
3. Otrokov, M. M., Klimovskikh, I. I., Bentmann, H., Estyunin, D., Zeugner, A., Aliev, Z. S., Gaß, S., Wolter, A. U.B., Koroleva, A. V., Shikin, A. M., Blanco-Rey, M., Hoffmann, M., Rusinov, I. P., Vyazovskaya, A. Yu, Eremeev, S. V., Koroteev, Yu M., Kuznetsov, V. M., Freyse, F., Sánchez-Barriga, J., Amiraslanov, I. R., Babanly, M. B., Mamedov, N. T., Abdullayev, N. A., Zverev, V. N., Alfonsov, A., Kataev, V., Büchner, B., Schiøtz, E. F., Kumar, S., Kimura, A., Petaccia, L., Di Santo, G., Vidal, R. C., Schatz, S., Kießner, K., Ünzelmann, M., Min, C. H., Moser, S., Peixoto, T. R.F., Reinert, F., Ernst, A., Echenique, P. M., Isaeva, A., Chulkov, E. V., Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // *Nature.* – 2019.- Vol. 576. – P. 416.
4. Klimovskikh, I. I., Otrokov, M. M., Estyunin, D., Eremeev, S. V., Filnov, S. O., Koroleva, A., Shevchenko, E., Voroshnin, V., Rybkin, A. G., Rusinov, I. P., Blanco-Rey, M., Hoffmann, M., Aliev, Z. S., Babanly, M. B., Amiraslanov, I. R., Abdullayev, N. A., Zverev, V. N., Kimura, A., Tereshchenko, O. E., Kokh, K. A., Petaccia, L., Di Santo, G., Ernst, A., Echenique, P. M., Mamedov, N. T., Shikin, A. M., Chulkov, E. V., Tunable 3D/2D magnetism in the $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ m topological insulators family // *npj Quantum Materials.* – 2020. – Vol. 5. - P. 54.

ER-XPS для анализа сложных наноразмерных систем

В.К. Макаров^{1,2}, Р.Г. Чумаков²

¹*Московский физико-технический институт, Москва*

²*НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) зарекомендовала себя как эффективный метод для анализа химического и валентного состава вещества. При этом расширение возможностей этого метода РФЭС с применением синхротронного излучения (СИ) и соответствующего математического алгоритма позволит насытить его дополнительными возможностями такими как: анализ формы, ориентации и глубин многослойной системы или интерфейсов. Данная задача в настоящий момент является приоритетным направлением огромного числа различных дисциплин.

Метод ER-XPS (РФЭС с разрешением по энергии возбуждения) позволяет собирать информацию о химическом составе образцов с различных глубин от их поверхности. ER-XPS опирается на базовую формулу для интенсивности РФЭС сигнала, зависящую от длины свободного пробега электрона. Основываясь на этой формуле, в настоящей работе был разработан математический алгоритм и его программная реализация для расчета толщин материалов для слоистых структур, а также параметров наноразмерных систем сложной геометрии (молекулы, наносферы, интерфейсы).

Для серии экспериментов по исследованию тонкой пленки молекул фторида фуллерена $C_{60}F_{18}$ на поверхности монокристалла золота Au(111) проведена обработка экспериментальных данных с помощью разработанного алгоритма ER-XPS. Данные молекулы обладают большим электрическим дипольным моментом ~ 10 Д [1] и в результате дипольных взаимодействий и взаимодействий с поверхностью происходит самоорганизация молекул в упорядоченную доменную структуру. Кроме того, ориентация молекул носит коллективный характер, с выделенным направлением дипольного момента внутри каждого домена. Из этого следует задача определения углов, которые занимают данные молекулы относительно нормали к поверхности. Для системы $C_{60}F_{18}/Au(111)$ была определена ориентация молекулы относительно подложки. Стоит отметить, что полученный результат совпадает с данными по сканирующей туннельной микроскопии [2]. Таким образом разработанная модель и соответствующий математический алгоритм позволяет интерпретировать данные РФЭС с разрешением по энергии возбуждения для анализа сложных наноразмерных систем.

1. Sukhanov L. P. et al. Study of the Electronic and Electrical Properties of the $C_{60}F_{18}$ Polar Molecule on Au(111) Surface // J. Surf. Investig. 2018. T. 12. № 4. С. 761–768

2. Bairagi K. et al. STM study of $C_{60}F_{18}$ high dipole moment molecules on Au(111) // Surf. Sci. 2015. T. 641. С. 248–251.

Влияние атомов Со на электронную структуру топологических изоляторов Bi_2Te_3 и MnBi_2Te_4

Т.П. Макарова¹, Д.А. Естюнин¹, С.О. Фильнов¹, Д.А. Глазкова¹, А.Г. Рыбкин¹, А.А. Гогина¹,
А.М. Шикин¹, И.И. Климовских¹

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет, г. Санкт-Петербург

В последнее время значительное внимание привлекается к исследованию новых квантовых материалов с уникальной электронной структурой, таких как топологические изоляторы (ТИ) [1]. Эти материалы являются перспективными элементами для электроники с низким энергопотреблением [2], спинтроники и реализации фундаментальных эффектов, таких как топологический магнитоэлектрический эффект [3] и квантовый аномальный эффект Холла [4]. Топологические изоляторы — это материалы с объемной запрещенной зоной и топологически защищенными проводящими состояниями на поверхности, существование которых обусловлено сильным спин-орбитальным взаимодействием, приводящим к инверсии объемной запрещенной зоны и изменению топологии материала. Поверхностные состояния характеризуются линейной дисперсией $E(k)$, имеющей вид так называемого конуса Дирака с геликоидальной спиновой структурой и фиксированным направлением спина к волновому вектору для всей поверхности Ферми. Данная особенность состояний исключает возможность обратного рассеяния электронов без изменения их спина (т.е. рассеяния на немагнитных примесях). Металлический характер поверхностных состояний оказывается защищенным благодаря наличию симметрии обращения времени [5]. Кроме того, это приводит к существованию точки вырождения состояний конуса Дирака по спину в точке их пересечения в вершине конуса (согласно теореме Крамерса) - так называемой точке Дирака. Однако, если нарушить симметрию обращения времени, в поверхностных состояниях образуется энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в точке Дирака зоны Бриллюэна, вследствие чего возможен переход материала в состояние квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ) [6]. Другим условием для реализации КАЭХ является расположение магнитно-индуцированной ЭЗЗ на уровне Ферми [7].

Существует несколько способов реализации магнитных ТИ, при этом один из наиболее перспективных способов открытия ЭЗЗ в точке Дирака – так называемый эффект «магнитного продолжения», а именно создание пленки стехиометрического магнитного ТИ на поверхности немагнитного ТИ. В таком случае топологическое состояние значительно проникает в область магнитной пленки и сильно расщепляется из-за прямого взаимодействия с магнитными моментами атомов.

Другим, и наиболее перспективным на данный момент решением является создание собственных стехиометрических магнитных ТИ, в которых магнитный металл стехиометрически встроен в кристаллическую решетку образца. Таким материалом является собственный антиферромагнитный MnBi_2Te_4 , и для него экспериментально возможно наблюдать ЭЗЗ порядка 60-70 мэВ [8]. Однако, поверхностная магнитная и электронная структура MnBi_2Te_4 в эксперименте оказывается отличной от теоретической, поэтому важным направлением исследований является модификация магнитной текстуры на поверхности собственных магнитных ТИ.

В данной работе экспериментально исследовались топологические изоляторы различной стехиометрии с адсорбцией атомов Со на поверхности методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. С целью изучения возможности формирования упорядоченных соединений исследовался топологический изолятор Bi_2Te_3 . Результаты, полученные для Bi_2Te_3 , показывают изменения поверхностной электронной структуры, в том числе положения точки Дирака и величины объемной запрещенной зоны, а также образование новой химической связи. Также анализировалась возможность модификации магнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 при напылении пленки Со. Для MnBi_2Te_4 наблюдались изменения в величине запрещенной зоны в точке Дирака и структуре внутренних пиков с образованием дополнительных компонент.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования (грант № 075-15-2020- 797 (13.1902.21.0024)).

1. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: topological insulators // *Reviews of modern physics*. 2010. №. 4. С. 3045.
2. Chen Y. P. Topological insulator-based energy efficient devices // *Micro-and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications IV*. 2012. Т. 8373. С. 83730B.
3. Topological axion states in the magnetic insulator MnBi_2Te_4 with the quantized magnetoelectric effect / Zhang, D., Shi, M., Zhu, T., Xing, D. // *Physical review letters*. 2019. №. 20. С. 206401
4. Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators / Yu, R., Zhang, W., Zhang, H. J., Zhang, S. C. // *Science*. 2010. №. 5987. С. 61-64.
5. Chang C. Z., Wei P., Moodera J. S. Breaking time reversal symmetry in topological insulators // *Mrs Bulletin*. 2014. №. 10. С. 867-872.
6. Chang C. Z., Li M. Quantum anomalous Hall effect in time-reversal-symmetry breaking topological insulators // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2016. №. 12. С. 123002.
7. Tokura Y., Yasuda K., Tsukazaki A. Magnetic topological insulators // *Nature Reviews Physics*. 2019. №. 2. С. 126-143.
8. Nature of the Dirac gap modulation and surface magnetic interaction in axion antiferromagnetic topological insulator / Shikin, A. M., Estyunin, D. A., Klimovskikh, I. I., Filnov S.O. // *Scientific Reports*. 2020. №. 1. С. 1-13.

Ферримагнетизм в квазисвободном графене

А.В. Тарасов¹, А.А. Рыбкина¹, А.В. Ерыженков¹, А.Г. Рыбкин¹

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

На сегодняшний день графен остается одним из наиболее интенсивно исследуемых материалов благодаря своему высокому потенциалу применения в 2D-электронике и спинтронике. Несмотря на то, что в своем свободном состоянии графен является немагнитным материалом со слабым спин-орбитальным взаимодействием (SOC), его электронные свойства могут значительно модифицироваться при контакте с атомами подложки. Так, например, взаимодействие графена с тяжелыми атомами может приводить к усилению SOC в графене, что в свою очередь делает возможным эффективную генерацию спиновых токов на основе спинового эффекта Холла и его квантовой версии [1]. С другой стороны, комбинация сильного спин-орбитального взаимодействия и магнетизма является необходимым условием для наблюдения квантового аномального эффекта Холла [2]. Такое сочетание может быть реализовано в системе Gt/Au/Co(0001), которая не только обеспечивает условия для реализации эффекта магнитной близости и гигантского эффекта Рашбы [3], но и позволяет сохранить линейный характер дисперсии электронных зон вблизи уровня Ферми и сверхвысокую подвижность носителей заряда.

В предыдущей работе нашей научной группы [4] сообщалось о реализации магнито-спин-орбитального графена на интерфейсе Au/Co(0001), характеризующегося петлевыми дислокациями в верхнем слое кобальта под графеном. Посредством проведения теоретических расчетов было показано, что дополнительная обменная связь в графене с гигантским расщеплением Рашбы приводит к асимметрии спинового расщепления в противоположных K и K' долинах. Однако из-за большой размерности суперструктуры с петлевыми дислокациями в слое Co расчет подобной системы представляет собой весьма трудоемкую задачу, и был ранее выполнен только в ограниченном варианте с небольшой структурной периодичностью (элементарная ячейка (2x2) по отношению к графеновой ячейке) и отсутствием петлевых дислокаций.

В данной работе расчеты в рамках теории функционала плотности (ТФП) были выполнены для более реалистичной модели системы Gt/Au/Co(0001) с периодом (9x9), содержащей в себе треугольные дефекты, наблюдаемые в данных сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Теоретические ТФП-расчеты были выполнены методом полного потенциала, основанного на использовании базисного набора присоединенных плоских волн и реализованного в вычислительном пакете Wien2k [5]. Первым шагом наших вычислений было моделирование СТМ изображений поверхности образца. Было обнаружено их совпадение с экспериментом в части проявления треугольных дефектов в местах нахождения петлевых дислокаций. Проведенные расчеты электронной структуры системы показали, что самосогласованным решением уравнения Шредингера для исследуемой системы является ферримагнитный порядок в A и B подрешетках графена. Подобное магнитное упорядочение системы, как оказалось, приводит к появлению запрещенной зоны в K-точке графена и асимметрии его спиновой структуры. Полученные теоретические результаты подтверждаются данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением (SARPES). Так же, как и в расчете, SARPES измерения демонстрируют появление запрещенной зоны величиной 60-100 мэВ и гигантское расщепление π состояний 40 и 80 мэВ в окрестностях противоположных K и K' точек при намагниченности слоя кобальта в плоскости поверхности и перпендикулярно ГК направлению. Кроме того, результаты ТФП-расчетов показывают, что обменное расщепление π -состояний графена с образованием запрещенной зоны в K точке графена наблюдается только лишь в случае ферримагнитной фазы графена и отсутствует в немагнитном состоянии системы. При этом, реконструкция интерфейса (монослой Au)/Co(0001), состоящая из периодических петлевых дислокаций, играет ключевую роль в передаче обменного взаимодействия графена, поскольку именно их присутствие в модели кардинальным образом меняет картину электронной структуры графена, создавая в нем запрещенную зону, вызванную неэквивалентностью A и B подрешеток из-за нарушения симметрии обращения времени.

Таким образом, реализация «магнито-спин-орбитальной» версии графена открывает новые горизонты как для прикладных, так и для фундаментальных исследований с использованием его уникальной электронной структуры.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №20-72-00031).

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
1. Kane C. L., Mele E. J. // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V. 95 - P. 146802
2. Phong V. T., Walet N. R. and Guinea F. // 2D Mater. - 2017. - V. 5 - P. 014004
3. Marchenko D. et al. // Nat. Commun. - 2012. - V. 3. - P. 1232
4. Rybkin A. G. et al. // Nano Letters. - 2018. - V. 18 - P. 1564
5. Blaha P. et al. // J. Chem. Phys. - 2020. - V. 152 - P. 074101

Эффективное взаимодействие Дзялошинского-Мория, спектр магнонов и рассеяние нейтронов в полностью поляризованной фазе слоистых магнетиков

О.И. Утесов^{1,2,3}, А.С. Щербаков¹

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

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

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

Хорошо известно, что в случае отсутствия центра инверсии между двумя магнитными ионами в эффективном спиновом гамильтониане появляется антисимметричное взаимодействие Дзялошинского-Мория (ВДМ) [1,2]. Одним из возможных источников нарушения инверсионной симметрии может служить интерфейс (граница раздела) между двумя разными магнитными материалами или между магнитным и немагнитным материалом [3]. В этом случае принято говорить об интерфейсном взаимодействии Дзялошинского-Мория (ИВДМ) [3].

ВДМ приводит к целому ряду интересных эффектов, таких как слабый ферромагнетизм, спиральные магнитные структуры и др. [1,4]. В структурах высокой симметрии оно позволяет стабилизировать топологически нетривиальные спиновые структуры: одиночные скирмионы и их упорядоченные массивы – скирмионные решетки. Эти объекты считаются перспективными для создания приборов, например, запоминающих устройств, основанных на новых принципах работы [5]. Как известно слоистые (наноструктурированные) системы дают больше возможностей по управлению своими свойствами [5]. В частности, за счет выбора параметров многослойных систем можно управлять ИВДМ, что влияет на стабильность и свойства топологических структур.

В данной работе рассматривается слоистая система с ИВДМ. Магнитные слои обладают двумя интерфейсами, и другим важным параметром – толщиной. Исследуется влияние ИВДМ на двух границах и толщины магнитных слоев на свойства спирального упорядочения. В частности, показано как вектор спирали зависит от этих параметров, что может быть описано в виде эффективного ВДМ. Также обсуждается спектр магнонов в полностью поляризованной фазе, который обладает щелью и минимумом на конечном значении волнового вектора. Показано, что неупругое малоугловое рассеяние нейтронов может быть использовано для характеристики системы.

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

1. I. E. Dzyaloshinskii, J. Phys. Chem. Solids 4, 241-255 (1958).
2. T. Moriya, Phys. Rev. 120, 91 (1960).
3. A. Fert, P.M. Levy, Phys. Rev. Lett. 44, 1538–1541 (1980).
4. I. E. Dzyaloshinskii, Sov. Phys. JETP 19(4), 960-971 (1964).
5. A.Fert, N. Reyren and V. Cros, Nature Reviews Materials 2, 17031 (2017).

Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC (0001)

С. О. Фильнов^{1*}, А. А. Рыбкина¹, А. В. Тарасов¹, А. Г. Рыбкин¹

¹ Санкт-Петербургский Государственный университет, Санкт-Петербург

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

Изучение и модификация электронной структуры графена по-прежнему является одной из ключевых задач в физике конденсированного состояния [1-7]. Линейный дисперсионный спектр электронов $E(k)$ в графене обеспечивает аномально высокую проводимость [1, 2]. В то время как возможность открытия запрещенной зоны в точке Дирака, при контакте с магнитными и тяжелыми металлами, позволяет обнаружить множество фундаментальных эффектов [4]. Более того, уникальные свойства конуса Дирака в графене, а также возможность его модификации открывает новые возможности для применения в элементах устройств спинтроники и микроэлектроники [3].

Однако, для реализации уникальных свойств данного материала, необходимо использовать изолирующие подложки. Карбид кремния (SiC) - один из наиболее доступных изоляционных материалов, используемых в современной микроэлектронике, и перспективная подложка для изготовления графена. В последнее время, проблема интеркаляции металлов под графен на SiC привлекает все больше внимания [7, 8]. В работах [7,8] был изучен процесс интеркаляции кобальта (Co) под графен на SiC. Было показано, что Co эффективно интеркалируется под графен, с образованием поверхностного сплава силицидов кобальта. Однако, процесс интеркаляции Co под графен сопровождается образованием вставок из несколько-слоевого графена. Это происходит ввиду того, что Co также интеркалируется под буферный слой графена (БСГ). Более того, процессы сплавления интеркалируемого металла и формирование ультратонких поверхностных пленок все еще остаются мало изучены.

В данной работе мы изучаем процесс формирования и электронную структуру графена при интеркаляции атомов Co под БСГ. Процесс интеркаляции изучается с помощью рентгеновской спектроскопии. С помощью методов рамановской спектроскопии рассеяния и атомно-силовой микроскопии мы изучаем морфологию и поверхностную структуру системы до и после интеркаляции. Электронная структура полученной системы изучается с помощью методов фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. С помощью расчетов методом теории функционала плотности мы изучаем поведение зонной структуры графена на возможных сплавах силицидов кобальта. Исследование данной системы важно для понимания формирования силицидов кобальта под графеном, а также для дальнейшей реализации магнитного спин-орбитального графена на диэлектрических подложках [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 18-12-00062.

1. S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, et. al., Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits, Appl. Phys. Lett. 92, 151911 (2008)
2. Shanshan Chen, Qingzhi Wu, Columbia Mishra, et. al., Thermal conductivity of isotopically modified graphene, Nature Materials 11, 203–207 (2012)
3. Frank Schwierz, Graphene transistors, Nature Nanotechnology 5, 487–496 (2010)
4. Artem G. Rybkin, Anna A. Rybkina, Mikhail M. Otrokov, et. al., Magneto-Spin-Orbit Graphene: Interplay between Exchange and Spin-Orbit Couplings, Nano Lett. 2018, 18, 3 (2018)
5. A. K. Geim, K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nature Materials 6, 183–191 (2007)
6. Wei Han, Roland K. Kawakami, Martin Gmitra, et. al., Graphene spintronics, Nature Nanotechnology 9, 794–807 (2014)
7. Guenther Ruhl, Sebastian Wittmann, Matthias Koenig, et. al., The integration of graphene into microelectronic devices, Beilstein J. Nanotechnol. 2017, 8, 1056–1064 (2017)
8. Г.С. Гребенюк, И.А. Елисеев, С.П. Лебедев, и др., Интеркаляционный синтез силицидов кобальта под графеном, выращенным на карбиде кремния, Физика твердого тела, 62,3 (2020)

Квантово-химическое исследование электронной структуры молекул с f-элементом в составе

П.А. Хадеева¹, В.М. Шахова², Ю.В. Ломачук², Н.С. Мосягин², А.В. Титов²

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
²НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

Молекулы с тяжелыми d- и f-элементами обладают исключительными свойствами, из-за которых они представляют широкий практический интерес. Однако теоретическое исследование электронных структур подобных систем на атомном уровне связано с рядом трудностей. Как правило, расчеты требуют одновременного учета релятивистских и корреляционных эффектов на самом высоком уровне. Связано это с тем, что поливалентные тяжелые d- и f-элементы часто имеют ярко выраженный мультikonфигурационный характер и высокую плотность низколежащих электронных состояний, для корректного описания которых требуется большая точность.

В работе была использована вычислительная технология, которая позволяет решать возникающие трудности. Она включает в себя расчет электронной структуры объекта исследования при помощи приближения релятивистского псевдопотенциала остова [1] для тяжелого d- или f-атома, которое позволяет сократить вычислительные затраты, путем уменьшения числа явно учтенных электронов. На следующем этапе проводится восстановление четырехкомпонентных волновых функций в области вблизи ядра [2] для вычисления различных свойств, в большинстве локализованных на атоме.

Объектами исследования выбраны молекулы YbHal_n (где $\text{Hal} = \text{F}, \text{Cl}$, $n = 2, 3$) с преимущественно ионным типом связи между атомами. Атом иттербия является дальним лантаноидом, свойства которого в некоторой степени повторяют свойства дальних актиноидов, изучение которых более трудная задача на данный момент. Также, атом иттербия находится в двух разных с точки зрения теоретического исследования валентных состояниях, +2 и +3: в первом 4f-оболочка полностью закрыта, а во втором открыта 4f-оболочка представляет собой непростой для вычислений случай.

Были найдены равновесные структуры и исследованы колебания молекул. Вычисленные данные были сравнены с доступными экспериментальными результатами. Были использованы методы теории функционала плотности и связанных кластеров.

Дополнительным критерием проверки корректности воспроизведения электронной структуры молекул был выбран химический сдвиг рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС) для атома иттербия. В расчетах был использован предложенный в работе [3] метод определения химических сдвигов РЭС. Полученные результаты были сравнены с экспериментальными значениями.

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

1. Mosyagin N. S., Zaitsevskii A., Titov A. V. Shape-consistent relativistic effective potentials of small atomic cores //International Review of Atomic and Molecular Physics. – 2010. – Т. 1. – №. 1. – С. 63-72.
2. Titov A. V. et al. P, T-parity violation effects in polar heavy-atom molecules //Recent Advances in the Theory of Chemical and Physical Systems. – Springer, Dordrecht, 2006. – С. 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. – Т. 88. – №. 6. – С. 062511.

Намагничивание сверхпроводящих дисков и колец при разной ориентации магнитного поля

Д. С. Чикуров, М. П. Волков

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

Устройства с участием сверхпроводящих материалов широко используются в ядерной физике и физике плазмы – это сверхпроводящие магниты, сверхпроводящие резонаторы, сверхпроводящие левитационные устройства различного назначения. Для создания надежных и эффективных сверхпроводящих устройств требуется обоснованное представление о том, как происходит процесс намагничивания сплошных и неодносвязных сверхпроводников, как влияет на этот процесс состояние поверхности сверхпроводника и как избежать неустойчивостей в виде скачков магнитного потока. Гистерезисное намагничивание объемных сверхпроводников второго рода хорошо описывается теорией критического состояния. Проникновение магнитного потока и возникновение скачков магнитного потока в планарных сверхпроводниках имеет свои особенности, которые требуют дополнительных исследований. Так, в работе [1] было показано, что кроме различия в намагниченности M сверхпроводника при приложении магнитного поля H вдоль и поперек плоскости образца, скачки магнитного потока также демонстрируют качественное отличие при разной ориентации магнитного поля. Проникновение потока в сверхпроводящие кольца может отличаться от проникновения потока в сплошные плоские образцы (диски) в связи с возможностью захвата потока в полости кольца, а скачки магнитного потока могут демонстрировать сильную зависимость амплитуды скачков от температуры [2].

В настоящей работе приведены экспериментальные данные об особенностях намагниченности и скачков магнитного потока в изотропном планарном сверхпроводнике II рода ниобии с сильным пиннингом. Намагниченность была измерена при помощи магнетометра VSM комплекса PPMS при ориентации магнитного поля нормально ($\alpha = 90^\circ$), параллельно ($\alpha = 0^\circ$) и под углом к поверхности плоского сверхпроводника. Для экспериментов использовалась фольга сильно деформированного чистого ниобия с $T_c = 9.25\text{K}$, толщиной 100 мкм. Образцы представляли собой сплошные плоские образцы (диски) и диски с центральным отверстием (кольца).

Было обнаружено, что намагниченность плоского диска качественно отличается при приложении магнитного поля вдоль или поперек плоскости образца. При обеих ориентациях магнитного поля зависимости $M(H)$ имеют сильно гистерезисный характер, но с разной зависимостью от магнитного поля. При температурах ниже $\sim T_c/2$ при обеих ориентациях магнитного поля на $M(H)$ появляются резкие особенности (скачки магнитного потока), вид которых существенно зависит от ориентации магнитного поля. В поперечной ориентации скачки наблюдаются при малых полях, имеют небольшие величины, в параллельной ориентации скачки наблюдаются во всем диапазоне магнитных полей и имеют большие величины. В поперечной ориентации скачки магнитного потока могут быть связаны со срывом вихрей с центров пиннинга, а в параллельной ориентации скачки могут быть инициированы преодолением поверхностного барьера связкой вихрей [1].

При уменьшении угла от поперечной ориентации магнитного поля к продольной изменение зависимости $M(H)$ и вида скачков магнитного потока от одного типа (поперечная геометрия) к другому типу (параллельная геометрия) происходит немонотонно. При отклонении от поперечной ориентации зависимости $M(H)$ качественно подобны в широком интервале углов, то же самое верно при отклонении от продольной ориентации, однако в меньшем интервале углов. Переход от одного вида зависимости $M(H)$ происходит скачкообразно в интервале углов между 45° и 15° между магнитным полем и плоскостью образца. Скачки магнитного потока также следуют этой тенденции: при отклонении от поперечной ориентации скачки до $\alpha = 45^\circ$ магнитного потока по виду похожи на скачки магнитного потока при $\alpha = 90^\circ$, вид скачков намагниченности при отклонении от 0° до 15° похож на скачки магнитного потока в продольной ориентации ($\alpha = 0^\circ$).

Кривые намагниченности $M(H)$ были разделены на обратимую и необратимую части по модели критического состояния (без учета краевого и поверхностного барьера). Необратимые части кривых $M(H)$, как и ожидалось, оказались симметричными относительно оси магнитного поля, а также показывали уменьшение пика в малых полях с увеличением угла между магнитным полем и плоскостью образца. Пик на обратимых кривых намагниченности при параллельной ориентации ($\alpha = 0^\circ$), которое может рассматриваться как поле проникновения вихрей в объем образца, оказалось много больше поля H_{c1} для чистого ниобия при этой же температуре, что говорит о существенной роли поверхностного барьера. Следует отметить, что постепенное изменение обратимой части кривой намагничивания M_g с уменьшением угла от $\alpha = 90^\circ$ до $\alpha = 0^\circ$ выглядит как постепенное увеличение пика в больших полях и постепенное уменьшение пика в малых полях с небольшим изменением положения полей этих пиков.

Сравнение намагниченности диска и кольца в поперечном поле показывает, что величина намагниченности для кольца, как и следовало ожидать, немного меньше, а величина и поле скачков близки для этих двух случаев. Такой похожий вид $M(H)$ для кольца и диска предполагает, что основной вклад в величину намагниченности вносят экранирующие токи, текущие по периферии образца, а скачки магнитного потока, как при увеличении, так и при уменьшении поля, происходят с краев плоского образца. Для ориентации магнитного поля параллельно плоскости образца, величина намагниченности и вид скачков магнитного потока заметно отличаются для диска и кольца. Это может быть связано с тем, что при параллельной ориентации существенно то, как направлено магнитное поле относительно направления прокатки, которая приводит к анизотропному распределению дефектов. Для корректного сравнения результатов измерения $M(H)$ для диска и кольца требуется проводить измерения при одинаковом угле между направлением прокатки и магнитным полем.

Таким образом, было показано, что образование критического состояния (вид зависимостей $M(H)$) и возникновение магнитных нестабильностей (скачков магнитного потока) происходят по-разному, в зависимости от ориентации магнитного поля относительно плоской поверхности сверхпроводника второго рода, причем переход от одного вида $M(H)$ и вида скачков потока к другому происходит при изменении угла немонотонным образом. Проникновение магнитного потока в кольца и вид скачков потока при нормальной ориентации магнитного поля слабо отличается от этих эффектов в сплошные образцы (диски).

ВТСП кабели второго поколения имеют планарную структуру (ленты). При создании магнитных систем из таких ВТСП лент в разных участках катушки лент будут находиться под действием магнитного поля, по-разному ориентированного относительно плоскости ленты. В связи с этим изучение особенностей образования критического состояния в плоских сверхпроводниках второго рода имеет практическое значение.

1. Чикуров Д.С., Волков М.П. Журнал Технической Физики. 2021. Т. 91, вып. 5. С. 784–793.
2. Nowak E.R., Taylor O.W., Liu L., Jaeger H.M., Selinder T.I. Physical Review B. 1997. Vol. 55(17). P. 11702–11705.

Влияние условий отжига на состав межфазной границы многослойных рентгеновских зеркал Мо/Ве

А.В. Соломонов, А.В. Каратаев, А.У. Гайсин, Е.О. Филатова

*Санкт-Петербургский государственный университет,
ул. Ульяновская, д.1, Петродворец, Санкт-Петербург, Россия*

Обладая высокой отражательной способностью, многослойные рентгеновские зеркала на основе молибдена и бериллия являются перспективными оптическими элементами для космических телескопов, исследования короны солнца [1], а также для технологий безмасочной ЭУФ литографии [2]. Для космического и литографического приложений многослойных структур, работающих в среде с повышенной температурой и подверженных сильному потоку излучения, чрезвычайно важна устойчивость их оптических параметров к нагреванию. Ряд исследований указывает на ухудшение отражательной способности многослойных рентгеновских зеркал Мо/Ве при температурах выше 200 °С [3].

Целью данной работы было изучение состава межслоевых областей многослойного рентгеновского зеркала Мо/Ве с/без барьерным слоем при различных температурах отжига методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Согласно работе [4], на межфазных границах структуры [Мо/Ве]₁₁₀ при комнатной температуре образуются два типа бериллида в зависимости от порядка нанесения слоев (МоВе₁₂ формируется на границе Ве-на-Мо и МоВе₂ на границе Мо-на-Ве). Нагрев структуры всего до 100° С приводит к уменьшению содержания чистого бериллия, сопровождающееся возрастанием МоВе₁₂, в системе. При температурах отжига выше 300° С содержание МоВе₂ резко возрастает и составляет 90% при 500° С.

Введение на межфазную границу системы [Мо/Ве]₁₁₀ барьерного слоя В₄С приводит к образованию новых соединений Ве_хВ_у и Ве₂С на границе раздела Ве-на-Мо и уменьшению содержания бериллидов на обеих границах раздела. Данная система оказывается устойчивой до температуры отжига 300°С. Нагрев системы при температурах выше 300°С приводит к увеличению вклада МоВе₁₂, при сохранении вклада МоВе₂. Можно утверждать, что данная система остается термически стабильной до 300°С.

Введение Si барьерного слоя в систему предотвращает образование бериллида МоВе₂ и частично МоВе₁₂. В процессе отжига системы обнаруживается образование незначительного содержания МоВе₂ и увеличение содержания МоВе₁₂ при температурах выше 300°С. Данная система также термически стабильна до 300°С. Можно сделать вывод, что введение барьерного слоя повышает область рабочих температур системы [Мо/Ве]₁₁₀.

Все исследования были проведены на комплексном фотоэлектронном и растровом оже-электронном спектрометре Thermo Fisher Scientific Escalab 250xi в Научном парке СПбГУ. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-72-20125.

1. Bogachev S.A. et al. Advanced materials for multilayer mirrors for extreme ultraviolet solar astronomy // Appl. Opt. 2016. Vol. 55, № 9. P. 2126.
2. Salashchenko N.N., Chkhalo N.I., Dyuzhev N.A. Maskless X-Ray Lithography Based on Microoptical Electromechanical Systems and Microfocus X-Ray Tubes // J. Surf. Investig. 2018. Vol. 12, № 5. P. 944–952.
3. Svechnikov M. V et al. Study of oxidation processes in Mo / Be multilayers Study of oxidation processes in Mo / Be multilayers. 2018. Vol. 075202.
4. Kasatkov S.A. et al. Study of Interfaces of Mo/Be Multilayer Mirrors Using X-ray Photoelectron Spectroscopy // J. Phys. Chem. C. 2019. Vol. 123, № 42. P. 25747–25755.

Recent progress in the development of in-beam Mössbauer spectrometer on the reactor PIK

M.V. Remizov¹, D.I. Bogmut¹, Yu.V. Kulvelis¹, L.I. Lisovskaya¹, I.S. Okunev¹,
A.V. Bashrichev¹, V.Ya. Sirotuk¹, V.G. Semenov², V.S. Kozlov¹, V.T. Lebedev¹

¹*Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov, NRC “Kurchatov Institute”,
Gatchina, Leningrad distr., Russia*

²*Saint-Petersburg State University, St.-Petersburg, Russia*

Actual problems in the development of gamma-resonance spectrometry to extend the variety of Mössbauer nuclei for wide application in physical, chemical, geological, biological studies and researches in material science make it extremely important to use neutron in-beam excitation of gamma-sources with short time of decay that is compensated by their continuous irradiation in reactor channels [1].

Recently the electrodynamic type prototype of the in-beam Mössbauer facility was commissioned and primary experiments were carried out on the carbon structures, such as Fe-intercalated graphenes [2,3], endofullerenes [4] and nanodiamonds with grafted Eu ions [5]. This model instrument is supplied with compact cooling system for the measurements at nitrogen temperatures.

The large-scale Mössbauer facility to be in few years built will serve to solve key problems of the design of advanced new material for carbon electronics, solar and hydrogen power devices, of novel generations of nanostructured materials for avia & cosmic industries, modern IT technologies, special functional materials also for safety tasks and solving ecological problems.

Presently computer modeling of spectrometer is in progress to adapt optimally the set up on the high flux reactor assuming also automatic system for samples change to combine the studies of nanomaterials pristine and irradiated in reactor active zone up to fluences 10^{20} n/cm².

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Researches (gr. No 18-29-19008).

[1] I. Lázár, A. Szilágyi, G. Sáfrán, Á. Szegedi, S. Stichleutner and K. Lázár: Iron oxyhydroxide aerogels and xerogels by controlled hydrolysis of FeCl₃·6H₂O in organic solvents: stages of formation, RSC Advances 5, 72716–72727 (2015)

[2] A.C. Камзин, I.M. Obaidat, B.C. Козлов, Е.В. Воронина, V. Narayanaswamy, I.A. Al-Omari. Нанокompозиты оксид графена/оксид железа (GrO/FeOx) для биомедицины: синтез и исследования. Физика твердого тела, 2021, том 63, вып. 6, С. 807-816.

[3] A.C. Камзин, I.M. Obaidat, B.C. Козлов, Е.В. Воронина, V. Narayanaswamy, I.A. Al-Omari. Магнитные нанокompозиты оксид графена/магнетит+кобальтовый феррит (GrO/Fe₃O₄+CoFe₂O₄) для магнитной гипертермии. Физика твердого тела, 2021, том 63, вып. 7, С. 900-910.

[4] В.М. Черепанов, В.Т. Лебедев, А.А. Борисенкова, Э.В. Фомин, А.Н. Артемьев, А.Д. Беляев, Г.А. Князев, А.Ю. Юренин, М.А. Чуев. Валентность и координация железа с углеродом в структурах на основе фуллерена C₆₀ по данным ЯГР-спектроскопии и EXAFS. // Кристаллография. 2020. Т.65. № 3. С.420-424.

[5] Yu. Kulvelis, V. Lebedev, E. Yudina, A. Shvidchenko, A. Aleksenskii, A. Vul, A. Kuklin. Structural Studies of Detonation Nanodiamonds with Grafted Metal Ions by Small-Angle Neutron Scattering. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, V. 14, Suppl. 1, P. S132–S133. © Pleiades Publishing, Ltd., 2020.

РККИ-взаимодействие в двумерной модели вейлевского полуметалла в присутствии спин-орбитального взаимодействия

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

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

² Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

Взаимодействие РККИ играет важную роль в исследовании свойств систем с локализованными спинами. Это явление в металлах было впервые описано в 50-х годах прошлого столетия в работах [1,2,3]. В системах со сферической Ферми-поверхностью для этого типа взаимодействия характерны осцилляции с частотой $2k_F$, где k_F - импульс Ферми, и убывание с расстоянием между взаимодействующими моментами, как R^{-d} (d - размерность)[4]. Этот результат обобщается на случаи более сложного спектра, где импульс Ферми принимает некоторое эффективное значение. В настоящее время активно изучается РККИ-взаимодействие в таких перспективных материалах, как вейлевские полуметаллы. В частности, в своих работах многие авторы рассматривают двумерный аналог данного вида материалов – графен. Оказывается, что при нулевом значении фермиевского импульса, в чистом графене, всё так же наблюдаются осцилляции. Однако теперь их период связан с расстоянием между дираковскими точками в обратном пространстве. Зависимость же энергии косвенного обменного взаимодействия от расстояния в чистом графене отличается от других двумерных систем, здесь РККИ убывает как R^{-3} .

Дираковские точки в графене стабильны только в отсутствие спин-орбитального взаимодействия. В нашей работе мы предлагаем вывод аналитических выражений для РККИ-взаимодействия в двумерной модели вейлевского полуметалла, в котором точки Дирака существуют в присутствии значительного спин-орбитального взаимодействия. Наша система содержит три дираковские точки на границе зоны Бриллюэна, причём одна из точек сдвинута по энергии относительно уровня Ферми, что говорит о наличии в системе ненулевого эффективного значения импульса Ферми. В результате в конечных формулах появляются несколько вкладов, отличающихся по своей структуре. Существуют слагаемые, убывающие с расстоянием как R^{-3} и имеющие осцилляции, связанные с расстоянием между точками Дирака в обратном пространстве, как это наблюдается в случае чистого графена. А также из-за наличия ненулевого эффективного импульса Ферми присутствуют вклады с характерными для РККИ $2k_F^*$ -осцилляциями и с убыванием R^{-2} , свойственным большинству двумерных систем. Наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к магнитной анизотропии кристалла. В выражении для магнитной восприимчивости появляются слагаемые, имеющие тензорную структуру магнито-дипольного взаимодействия.

1. C. Kittel, M.A. Ruderman. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. Phys. Rev., 96, 99 (1954).
2. T. Kasuya. A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on Zener's model. Prog. Theor. Phys., 16, 45 (1956).
3. K. Yosida. Magnetic properties of Cu-Mn alloys. Phys. Rev., 106, 893 (1957).
4. D.N. Aristov, Indirect RKKY interaction in any dimensionality. Phys. Rev. B, 55, 8064 (1997).

Девияция нерадиальных геодезических в статичном сферически симметричном пространстве-времени

В.П. Вандеев, А.Н. Семенова

НИЦ «КИ» – ПИЯФ, Гатчина

Рассматривается уравнение девияции геодезических в случае свободного нерадиального движения в статичном сферически симметричном гравитационном поле чёрной дыры. Предложен альтернативный способ его диагонализации, который в отличие от известного ранее [1] использует только методы линейной алгебры. Далее для простоты рассматривается метрика Шварцшильда.

Аналогично работам [2] и [3] исследуются выражения для пространственных компонент приливных сил. Наличие ненулевого углового момента L приводит к различному поведению полярной и азимутальной компонент приливных сил, но не меняет монотонности зависимости от радиуса всех пространственных компонент.

Так как решения уравнения девияции при ненулевом угловом моменте не могут быть получены в элементарных функциях, они были построены численно для различных значений интегралов движения E и L . Как и ожидалось, для всех них точка начала отсчёта является особой, так как это физическая сингулярность. При больших значениях углового момента численные решения обрываются вблизи горизонта событий, так как в этом случае тело не может упасть под горизонт.

Также были получены локальные решения рассматриваемых уравнений в окрестности физической сингулярности и пространственной бесконечности в форме обобщенных степенных рядов. При сравнении решений в окрестности физической сингулярности для радиальных и нерадиальных геодезических обнаруживается, что поведение радиальной компоненты вектора девияции не зависит от наличия углового момента, тогда как угловые компоненты меняются с его появлением: азимутальная компонента меняет корневой рост на линейный, а полярная меняет корневой рост на локально постоянное поведение. На больших расстояниях от чёрной дыры, как и ожидалось, наличие углового момента не влияет на поведение компонент вектора девияции.

В пределе бесконечно больших L были получены аналитические решения уравнений геодезического отклонения. Аналитические и локальные решения полностью соответствуют численным.

1. Fush H. Solutions of the Equations of geodesic Deviation for static spherical symmetric space-times // *Annalen der Physik*. 1983. 495. С. 231.
2. Crispino L.C.B., et al., Tidal Forces in Reissner-Nordström Spacetimes // *The European Physical Journal C*. 2016. 76. С. 168.
3. Vandeev V.P., Semenova A.N., Tidal Forces in Kottler Spacetimes // *The European Physical Journal C*. 2021. 81. С. 610.

Экранировка поля релятивистской заряженной частицы в диспергирующей среде

Д.В. Гавриленко¹, А.А. Тищенко^{1,2,3}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

²Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва

³Международная научно-образовательная лаборатория радиационной физики, Национальный исследовательский университет "БелГУ", Белгород

Излучение, генерируемое релятивистскими заряженными частицами, лежит в основе неинвазивной диагностики пучков в линейных и кольцевых ускорителях [1-4]. От конфигурации собственного поля зависит мощность излучения и оптимальное расположение излучающих элементов. Это важно для диагностики, т. к. в параметрах излучения содержится важная информация о свойствах пучка. Но, кроме того, конфигурация собственного поля важна и в проблемах устойчивости электронных пучков в ускорителях и коллайдерах, где процессы неустойчивости определяют важнейшую характеристику – время жизни пучка. Поэтому вопросы экранировки поля заряженной частицы её окружением играют значительную роль.

По умолчанию считается, что окружение экранирует, т.е. ослабляет поле заряженной частицы. Однако, в данной работе мы показываем, что для движущегося заряда процесс экранировки собственного поля диэлектриком отличается от экранировки электростатического поля. Мы рассмотрели зависимость величины поля от расстояния при различных диэлектрических проницаемостях. Существуют параметры, при которых зависимость от диэлектрической проницаемости естественная: модуль напряженности поля обратно пропорционален ей. Однако, как мы показываем, в общем случае зависимость не является монотонной, и более того, существует область пространства, в которой поле в веществе превышает поле в вакууме – иными словами, окружающая среда может не только ослаблять, но и усиливать поле! Это важно для качественного понимания процессов генерации излучения релятивистскими заряженными частицами. Мы определили параметры, при которых усиление составляет 63% на расстоянии $\gamma\beta\lambda_{\text{vac}}/2\pi$ от траектории движения заряда – в области, где поле в частотном домене эффективно отлично от 0 (здесь γ – Лоренц-фактор, β – приведенная скорость, λ_{vac} – длина волны в вакууме). Также для скорости, много меньшей скорости света в среде ($\epsilon\beta^2 \ll 1$), оценено расстояние, на котором поле в веществе начинает превышать поле в вакууме: $(\gamma\beta\lambda_{\text{vac}}/2\pi)\ln(1/\epsilon^2\gamma)/(2(\gamma-1))$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования, проект № FZWG-2020-0032 (2019-1569) конкурсной части госзадания по созданию и развитию лабораторий, и проект № 0723-2020-0037.

1. V. Blackmore, G. Doucas, C. Perry *et al.*, First measurements of the longitudinal bunch profile of a 28.5 GeV beam using coherent Smith-Purcell radiation, *Phys. Rev. ST AB* **12**, 032803 (2009).
2. G.Kube, H.Backe, W.Lauth and H.Schope, Smith-Purcell radiation in view of particle beam diagnostics, *Proc. of the 6th European Workshop on Beam Diagnostics and Instrumentation for Particle Accelerators*, Mainz, Germany, 2003.
3. G. Kube, Requirements for Beam Diagnostic & Measurement Principles, *Proc. of the 2018 CERN-Accelerator-School course on Beam Instrumentation*, pp. 18-120, Tuusula, Finland, 2018.
4. R. Bartolini, C. Clarke, N. Delerue *et al.*, Electron bunch profile reconstruction in the few fs regime using coherent Smith-Purcell radiation, *JINST* **7**, P01009 (2012).

Эффект предволновой зоны в переходном излучении от метаповерхности

Д.И. Гараев^{1,2}, Д.Ю. Сергеева^{1,2}, А.А. Тищенко^{1,2,3}

¹*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва*

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

³*Международная научно-образовательная лаборатория радиационной физики, НИУ "БелГУ", Белгород*

Переходное излучение, возникающее при пролёте заряда через границу раздела сред, лежит в основе диагностики параметров пучков заряженных частиц в ускорителях [1], а также высокоинтенсивных источников электромагнитного излучения [2]. Теоретическое описание этого процесса в основном ограничено рассмотрением волновой зоны излучения [3]. В то же время для ультрарелятивистских частиц волновая зона в миллиметровом диапазоне длин волн может начинаться в десятках метров от мишени, что значительно усложняет проведение корректного эксперимента. В работе [4] были качественно рассмотрены характеристики переходного излучения в предволновой зоне и обнаружены следующие его особенности: значительное уширение пиков излучения и их пространственное смещение.

Ранее нами была построена теория излучения поляризационных токов, возбуждаемых в особом классе мишеней – метаповерхностях, представляющих собой монослой периодически расположенных субволновых частиц [5, 6]. В этой работе мы обобщаем теорию переходного излучения от метаповерхности на случай предволновой зоны и представляем полностью аналитические выражения для характеристик поля.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-00113, <https://rscf.ru/project/21-72-00113/>.

1. L. G. Sukhikh, G. Kube and A. P. Potylitsyn, Simulation of transition radiation based beam imaging from tilted targets // *Phys. Rev. Accel. Beams*. 2017. № 20. P. 032802.
2. Coherent transition radiation at submillimeter and millimeter wavelengths / T. Takahashi, Y. Shibata, F. Arai, K. Ishi, T. Ohsaka, M. Ikezawa, Y. Kondo, T. Nakazato, S. Urasawa, R. Kato, S. Niwano, and M. Oyamada // *Phys. Rev. E*. 1993. № 48. P. 4674.
3. В. Л. Гинзбург, В. Н. Цытович. Переходное излучение и переходное рассеяние. Москва : Наука, 1984. 360 с.
4. Д. В. Карловец, А. П. Потылицын. Излучение Смита–Парселла в “предволновой” зоне // *Письма в ЖЭТФ*. 2006. Том 84. Выпуск 9. С. 579–583.
5. THz Smith–Purcell and grating transition radiation from metasurface: experiment and theory / D. Yu. Sergeeva, A. S. Aryshev, A. A. Tishchenko, K. E. Popov, N. Terunuma, and J. Urakawa // *Optics Letters*. 2021. Vol. 46. Issue 3. P. 544-547.
6. D. I. Garaev, D. Yu. Sergeeva, and A. A. Tishchenko. Theory of Smith-Purcell radiation from a 2D array of small noninteracting particles // *Phys. Rev. B*. 2021. №103, P. 075403.

Analytical and numerical analysis of the isotope shift in spectra of superheavy ions

N. K. Dulaev

Saint Petersburg State University, Saint Petersburg

Isotope shift is the difference of atomic energy levels between isotopes of the same element. Nowadays, the isotope shift is widely used in study of the nuclear structure, astrophysical objects and laboratory plasma isotope composition [1]. Precision isotope shift spectroscopy can help in searching new physics beyond the standard model such as a new force carrier particle [2] and variations in time of the fundamental constants [3]. Another application of the isotope shift spectroscopy is the search of metastable superheavy element (SHE) transitions in astrophysical data [4]. To predict these atomic transition energies for stable neutron-rich isotopes of SHEs, the calculated isotope shifts must be added to the atomic transition energies measured in laboratories for the neutron-poor unstable isotopes.

The isotope shift is given by a sum of the mass shift and the field shift. The first one arises due to the finite nuclear mass, the second one takes into account the finite nuclear size effect. Within the framework of the one-electron approximation, the previously derived analytical formulae for evaluation of the isotopic shift lead to rather large deviations from the exact results when the nuclear charge number becomes larger than $Z=100$.

In the present work, an analytical analysis of the field shift in hydrogen-like ions with $Z>100$ is performed. The nuclear model of the uniformly charged sphere is employed. Simple approximate formulae based on the analytical results are obtained for $1s$ and $2p_{1/2}$ states of hydrogen-like ions using numerical methods.

1. M. Dong et al. // Analytical Chemistry 85(5), 2899-2906, 2013
2. J. C. Berengut et al. // Phys. Rev. Lett. 120, 091801, 2018
3. J. C. Berengut et al. // Phys. Rev. A 73, 012504, 2006
4. V. A. Dzuba et al. // Phys. Rev A 95, 062515, 2017

Получение оценок критического индекса z динамической А-модели в пятипетлевоm приближении

Д.А. Евдокимов, Л.Ц. Аджемян

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Фазовые переходы второго рода и критические явления характеризуются аномальным возрастанием радиуса корреляции и времени релаксации. При приближении температуры к критическому значению эти величины растут степенным образом, показатели степеней носят название критических индексов. Это универсальные константы, зависящие от размерности пространства и числа компонент параметра порядка, и при этом одинаковые для всех веществ. Существует несколько подходов к получению оценок критических индексов – высокотемпературное разложение, различные вариации метода Монте-Карло, метод ренормгруппы. Последний позволяет получить выражение для индекса в виде асимптотического разложения по параметру отклонения $\varepsilon=4-d$ размерности от критического значения $d_c=4$. Возможны и альтернативные разложения, например, по параметру $\varepsilon'=d-1$ [1]. Полученные коэффициенты разложения обладают факториальным ростом, поэтому для получения осмысленных результатов необходимо проводить процедуру пересуммирования, точность которой возрастает с увеличением числа учтенных членов разложения.

Целью данной работы является получение оценок критического индекса z , отвечающего за поведение времени релаксации $t_c \sim r_c^z$ (r_c – радиус корреляции), путем проведения пересуммирования рядов из недавно посчитанных [2] пяти членов ε – разложения и двух членов ε' -разложения. Для этого были использованы метод аппроксимаций Паде и новая модификация метода конформ-борелевского пересуммирования, предложенная в работе [2]. Его точность можно существенно повысить, если учитывать параметр асимптотики сильной связи коэффициентов разложения и, как было отмечено в работе [3], точно известное значение индекса в некоторой размерности. Однако для индекса z обе эти величины неизвестны. Модификация метода заключается в использовании критерия сходимости, позволяющего определять эти два параметра из условия наилучшей сходимости результатов пересуммирования при учете каждого следующего члена разложения.

Как следует из проведенных расчетов, учет пятого члена $\varepsilon=4-d$ –разложения и двух членов $\varepsilon'=d-1$ -разложения позволил существенно сблизить ренормгрупповые оценки динамического индекса z с результатами моделирования методом Монте-Карло [4] [5]. Тот факт, что два принципиально разных метода находятся в согласии, говорит о высокой степени надежности полученных оценок индекса z , эффективности модификации борелевского пересуммирования, а также свидетельствует о целесообразности расчета следующих порядков альтернативного $\varepsilon'=d-1$ разложения.

1. BI Halperin, PC Hohenberg, and Shang-keng Ma. Calculation of dynamic critical properties using Wilson's expansion methods. *Physical Review Letters*, 29(23):1548, 1972.
2. Hnatic M, Adzhemyan L Ts, Ivanova EV and Kompaniets MV. Five-loop ε -expansion of critical exponent z of model A. To be published.
3. Riccardo Guida and Jean Zinn-Justin. Critical exponents of the n-vector model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(40):8103, 1998.
4. Jian-Sheng Wang and Chee Kwan Gan. Nonequilibrium relaxation of the two-dimensional ising model:Series-expansion and Monte Carlo studies. *Phys. Rev. E*, 57:6548, Jun 1998.
5. Martin Hasenbusch. Dynamical critical exponent z of the three-dimensional Ising universality class: Monte Carlo simulations of the improved Blume-Capel model. *Physical Review E*, 101:022126, 2020.

Построение канонического формализма для теории вложения

Т.И. Зайцева

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург

Теория вложения является подходом к описанию гравитации, в котором в качестве независимой переменной выступает четырёхмерная поверхность $y^a(x^\mu)$ в плоском объемлющем пространстве большего числа измерений — так называемая функция вложения [1]. Действием теории является обычное действие Эйнштейна-Гильберта, метрика считается индуцированной. Построение канонического формализма для такой теории производилось в работе [2]. Несмотря на то, что в работе [2] не удалось получить все связи явно, это не помешало найти алгебру связей. В докладе будет описан альтернативный способ построения канонического формализма для теории вложения. Предлагаемый способ использует тот факт, что действие теории вложения может быть переписано как сумма действия ОТО в переменных Арновитта—Дезера—Мизнера и действия некоторой дополнительной фиктивной материи. Будут обсуждаться трудности, связанные с таким подходом к построению канонического формализма, а также связь такого канонического формализма с построенным в работе [2].

1. Regge T., Teitelboim C. General relativity `a la string: a progress report // In Proceedings of the First Marcel Grossmann Meeting, Trieste, Italy. 1975.
2. Paston S. A., Semenova E. N. External time canonical formalism for gravity in terms of embedding theory // Gravitation and Cosmology. 21: 3. 2015. P. 181–190.

Получение надежных оценок критического индекса ν модели φ^4 при $n=0$

Д.В. Захаров, Л.Ц. Аджемян

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Общие черты описания поведения цепных полимеров с большим числом звеньев N в хорошем растворителе и поведения ферромагнетиков вблизи точки Кюри были впервые отмечены Де Женом [1]. Статистические характеристики макромолекулы могут быть заданы функцией $\rho(s)$, определяющей вероятность того, что ее концы находятся на расстоянии s . Она позволяет, в частности, рассчитать среднеквадратичное расстояние между концами - так называемый радиус Флори R_F . Сложность в нахождении зависимости радиуса Флори от длины цепочки N существенно зависит от размерности пространства d . Если пренебречь взаимным отталкиванием звеньев цепочки, то задача сводится к задаче случайных блужданий и $R_F \sim \sqrt{N}$. Так и будет для пространств достаточно высокой размерности $d > 4$, в которых роль самопересечений не существенна. В случае $d < 4$ запрет на учет самопересечений приводит, как показывает эксперимент (натуральный и численный), к закону вида $R_F \sim N^\nu$, где $\nu(d) > 0.5$. Задача теории - обосновать этот закон и рассчитать $\nu(d)$.

Поведение ферромагнетиков вблизи точки Кюри также становится простым при $d > 4$ - в этом случае справедлива теория среднего поля. При $d < 4$ необходим учет растущих при $\tau = \frac{T-T_c}{T_c} \rightarrow 0$ флуктуаций, характеризующихся радиусом корреляции $\xi \sim \tau^{-\nu}$. Индекс $\nu = 0.5$ при $d > 4$, при $d < 4$ метод ренормгруппы позволяет в рамках φ^4 модели вычислять этот индекс в виде ряда по степеням отклонения $\varepsilon = 4 - d$ размерности пространства от критического значения $d_c = 4$. Де Жен отметил, что обсуждаемая аналогия оказывается еще более тесной, если рассмотреть зависимость характеристик фазового перехода от числа компонент параметра порядка n , которое определяется структурой решетки. Модель ферромагнетика переходит в модель случайных блужданий без самопересечений, если положить $n = 0$, при этом асимптотике $\tau \rightarrow 0$ соответствует $N \rightarrow \infty$, а функция $\rho(s)$ принимает скейлинговую форму [1],[2].

В последнее время достигнут большой прогресс в нахождении старших членов ε -разложения и точность разложения до ε^7 включительно [3], [4]. Однако ряды ε разложения являются асимптотическими и их необходимо пересуммировать. Целью настоящей работы является проведение такого пересуммирования ряда ε -разложения. Спецификой определения индекса ν для случая $n = 0$ является то, что известно его точное значение $\nu = 1$ для случая $d = 1$ (это очевидно из постановки задачи для случайных блужданий), а также гипотетическое предположение $\nu = 0.75$ для $d = 2$, высказанное в статье [5]. Проверка данной гипотезы также будет являться целью данной работы. Знание же граничного значения в $d = 1$ можно использовать двойко - оно может служить тестом для проверки эффективности используемых методов суммирования при определении значения ν при $d = 3$ и $d = 2$, а может использоваться как информация, дополняющая ε -разложение. Пересуммирование реализуется различными методами, в основе которых лежат борелевское пересуммирование и аппроксимация Паде.

По результатам проведенной работы можно заключить, что учет дополнительных граничных значений существенно улучшает сходимость к предположительно верному значению. Результаты в $d = 1, 3$, полученные различными методами пересуммирования, хорошо согласуются с результатами других работ [6],[7]. В то же время для $d = 2$ во всех способах пересуммирования, результаты противоречат значению 0.75. Это обстоятельство связано, возможно, с тем, что именно при $d = 2$ в системе возникают дополнительные симметрии, не учтенные в ε -разложении.

1. Pierre-Gilles de Gennes. Scaling Concepts in Polymer Physics. Cornell University Press, 1979.
2. Jean Zinn-Justin. Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Clarendon Press. Oxford, 1996.
3. Mikhail V Kompaniets and Erik Panzer. Minimally subtracted six-loop renormalization of $o(n)$ -symmetric φ^4 theory and critical exponents. Physical Review D, 96(3):036016, 2017.
4. Oliver Schnetz. Numbers and functions in quantum field theory. Physical Review D, 97(8):085018, 2018.
5. B. Nienhuis. Exact critical point and critical exponents of $o(n)$ models in two dimensions. Phys. Rev. Lett., 49:1062-1065, 1982.
6. Paul J. Flory. Statistical Mechanics of Chain Molecules. Interscience publishers, 1969.
7. N. Clisby and B. Dünweg. High-precision estimate of the hydrodynamic radius for self-avoiding walks. Phys. Rev. E 94, 2016.

Чувствительность электронной структуры молекулы RaOCH_3 с открытой оболочкой к P, T-нечетным эффектам

А.В. Захарова^{1,2}

¹ПИАФ НИЦ КИ, Гатчина

²СПбГУ, Санкт-Петербург

В настоящий момент большинство экспериментов по поиску эффектов нарушения пространственной четности (P) и временной инвариантности (T) проводится на двухатомных и трехатомных молекулах. Интерес к этим молекулам связан с наличием уровней противоположной четности (1-дублетов), смещение которых во внешнем поле чувствительно к эффектам нарушения P и T-четности [1]. Наилучшие ограничения на один из таких эффектов, электрический дипольный момент электрона (eЭДМ), получены в экспериментах на двухатомных молекулах [2]. Многоатомные молекулы типа «симметричного волчка» обладают еще ближе расположенными уровнями противоположной четности, K-дублетами, что делает их чувствительными для поиска эффектов нарушения P, T-четности в меньших внешних полях и, следовательно, более перспективными кандидатами для поиска Новой физики за пределами Стандартной модели.

В работе проведено исследование электронной структуры нейтральной шестиатомной молекулы RaOCH_3 . Методом CCSD была получена потенциальная поверхность, найдены колебательно-вращательные волновые функции в гармоническом приближении и проведен учёт ангармонических поправок по теории возмущений. Были рассчитаны параметры W_d и W_s , отвечающие за чувствительность P, T – нарушениям.

Благодарности: Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» № 21-1-5-72-1

1. Zakharova A., Petrov A. P, T-odd effects for the RaOH molecule in the excited vibrational state //Physical Review A. – 2021. – Т. 103. – №. 3. – С. 032819.
2. Andreev V., Hutzler N. R. Improved limit on the electric dipole moment of the electron //Nature. – 2018. – Т. 562. – №. 7727. – С. 355-360.

R-процесс: роль электронов и позитронов в образовании зародышевых ядер

А.Ю. Игнатовский^{1,2}, И.В. Панов^{1,2}, А.В. Юдин^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт»-ИТЭФ, Москва

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Нуклеосинтез в разлетающемся и остывающем веществе маломассивной нейтронной звезды (МНЗ), потерявшей массу в результате эволюции системы двух нейтронных звезд изначально существенно разных масс [1], проходит в три этапа: 1) взрыв МНЗ; 2) взрывной нуклеосинтез на стадии разлета нейтронизованного вещества МНЗ, длящийся доли секунды; 3) образование тяжелых элементов под действием нейтронов. Когда нейтронизованное вещество разлетится на десятки километров и температура упадет ниже $T_9 < 2$, реакции с заряженными частицами заморозятся, а новые ядра будут образовываться только за счет захвата нейтронов и бета-распадов [2].

Для последовательного и более точного описания стадии перехода от состояния горячего вещества субъядерной плотности к условиям, при которых начинается r-процесс, в дополнение к термоядерным реакциям необходимо учитывать реакции взаимодействия позитронов и электронов с нуклонами и ядрами [3].

Разработанный алгоритм учета захватов электронов и позитронов был опробован в разных условиях – при взрыве СО-ядра термоядерной сверхновой [4] и в разлетающемся нейтронизованном веществе, выброшенном при слиянии нейтронных звезд.

В докладе показано, что роль захвата позитронов и электронов существенна в переходных условиях от NSE к r-процессу. Поэтому эти реакции нужно учитывать в нуклеосинтезе тяжелых элементов в веществе выброса, образующегося в процессе взрыва маломассивной нейтронной звезды.

Работа поддержана Российским Научным фондом (проект № 21-12-00061).

1. Блинные С. И., Надёжин Д. К., Крамарев Н. И., Юдин А. В. Слияния нейтронных звёзд и гамма-всплески: модель обдирания // *Астрономический Журнал*. 2021. том 98. № 5. с. 379–386.
2. Панов И. В., Юдин А. В. Образование тяжёлых элементов при взрыве маломассивной нейтронной звезды в тесной двойной системе // *Письма в Астрономический журнал*. 2020. том 46. № 8. с. 552–561.
3. Langanke K.-H., Martinez-Pinedo G. Rate Tables for the Weak Processes of pf-SHELL Nuclei in Stellar Environments // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. 2001. Vol. 79. Issue 1. p. 1-46.
4. Panov I. V., Glazyrin S. I., Röpke F. K., Blinnikov S. I. Nucleosynthesis during a Thermonuclear Supernova Explosion // *Astronomy Letters*. 2018. Vol. 44. Issue 5. p. 309–314.

Конфайнмент в калибровочных теориях: от двумерных сигма моделей к неабелевым струнам

Е.А. Иевлев

*ФГБУ "Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ КИ"
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" им. В.И.
Ульянова (Ленина)*

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет ИТМО

Конфайнмент, или невылетание в квантовой хромодинамике (КХД) уже более пятидесяти лет было и остаётся одним из самых интересных явлений, попадающих под пристальное внимание теоретической физики. Это явление может быть грубо охарактеризовано как отсутствие свободных кварков (и других цветных частиц) в физическом спектре. Сформулированный таким образом конфайнмент, на первый взгляд, может показаться простым. Однако каждому, кто изучал этот вопрос, ясно одно: картина конфайнмента в калибровочных теориях вовсе не очевидна, и до полного понимания проблемы предстоит ещё долгий путь.

Для того, чтобы разобраться в невылетании в КХД, было предпринято множество попыток посмотреть на более простые (или даже решаемые) модели, в которых наблюдается сходное явление. Можно упомянуть, к примеру, двумерную CP сигма модель, Поляковский конфайнмент в трёхмерии, четырёхмерную модель с абелевым Хиггсом. Однако конкретный механизм конфайнмента в каждом из этих сценариев кажется особенным и непохожим на остальные.

В данном докладе мы коснёмся некоторых из перечисленных сценариев. Мы также обсудим неабелевы струны, которые возникают в суперсимметричных "родственницах" квантовой хромодинамики [1-5]. Картина таких струн позволяет связать некоторые из, казалось бы, различных картин конфайнмента.

1. Ievlev E. Non-Abelian strings in N=1 supersymmetric QCD / E. Ievlev, A. Yung // Phys. Rev. D – 2017 – Vol. 95 – P. 125004
2. Ievlev E. What Becomes of Semilocal non-Abelian strings in N=1 supersymmetric QCD / E. Ievlev, A. Yung // Phys. Rev. D – 2018 – Vol. 98 – P. 094033
3. Ievlev E. Non-Abelian strings in N=1 supersymmetric QCD (Conference Paper) / E. Ievlev, A. Yung EPJ Web of Conferences – 2018 – Vol. 191 – P. 06003
4. Gorsky A. Dynamics of non-Abelian strings in the theory interpolating from N=2 to N=1 supersymmetric QCD / A. Gorsky, E. Ievlev, A. Yung // Phys. Rev. D – 2020 – Vol. 101 – P. 014013
5. Ievlev E. String Baryon in Four-Dimensional N=2 Supersymmetric QCD from the 2D-4D Correspondence / E. Ievlev, M. Shifman, A. Yung // Phys. Rev. D – 2020 – Vol. 102, № 5. – P. 054026

Electron affinity of Oganesson

M. Y. Kaygorodov, V. M. Shabaev

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

During the last decades, a great progress in synthesis of superheavy elements (SHEs) was accomplished in the seventh period of the periodic table [1, 2]. The electronic structure of these elements at the edge of the periodic table challenges atomic physics. A large number of electrons coupled with a complex interaction between the correlation, relativistic, and quantumelectrodynamics (QED) effects may outcome in completely different SHEs physical properties compared to their lighter homologous.

An example of SHEs property, which is completely different from the one of their lighter homologous, was found in Oganesson (118) atom. The relativistic calculations by means of the relativistic Fock-space coupled clusters (FSCC) method [1, 2] demonstrated that Og, which belongs to the noble gases group, has nonzero electronic affinity (EA). In other words, Og may form a negatively charged ion, whereas the other noble gasses cannot. More recent theoretical calculations performed exploiting the relativistic configuration interaction (CI) method [3] proved that the EA is nonzero, as well. However, between these two results were 40% discrepancy.

The main obstacle in calculations of the EA in Oganesson is that the bound state for negatively charged ion within the Dirac-Fock theory is absent, and the very effect is entirely due to the interelectronic interaction effects beyond the one-electron approximation. In present work, the EA is computed using two different method of electronic correlation treatment, namely, FSCC and CI. For the first time, the contribution from the full iterative triple excitations in FSCC method is evaluated using the EXP-T package. Both the results agree with each other within the numerical uncertainty. The contribution from the QED effects to the EA is evaluated using the model QED operator approach and found to be several times smaller than the previous calculations predict.

1. E. Eliav et al. // *Phys. Rev. Lett.* 77, 5350 (1996).
2. I. Goidenko et al. // *Phys. Rev. A* 67, 020102 (2003).
3. B. G. C. Lackenby et al. // *Phys. Rev. A* 98, 042512 (2018).

Comparison of one- and two-photon annihilation cross sections in collisions of positrons with H-like ions

Z.A. Mandrykina¹, V.A. Zaytsev¹, V.A. Yerokhin², and V.M. Shabaev¹

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

²*Center for Advanced Studies, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russia*

Investigations of the interactions of positron - the simplest antimatter particle - with atoms, molecules, and solids are of fundamental and practical interest. One of the most important acts of interaction is the process of annihilation with electrons in the matter. The investigation of this process has led to the development of positron-emission tomography, methods to study the defects in metals and semiconductors, and many other applications. The annihilation with inner-shell electrons of heavy systems is of particular interest. Such processes provide a unique opportunity to perform antimatter research in the presence of a strong electrical field of the nucleus which is several orders of magnitude larger than one at modern laser facilities. Moreover, new experimental studies on the interactions of positrons with various ionic and atomic targets are expected in the near future due to the appearance of positron facilities of a new generation at the Lawrence Livermore National Laboratory (California, USA) and the ELI-NP Research Center (Bucharest, Romania). All these and many other applications, as well as experimental studies, require a quantitative understanding of the positron-electron annihilation processes in the presence of a strong nucleus field.

The annihilation of positrons with bound electrons can proceed via the emission of one, two, or more photons. While two-quantum annihilation is most likely to occur in light systems, it is expected that one-photon annihilation may dominate in heavy systems [1]. The exact description of the process of the one-photon annihilation of positrons with bound electrons of heavy systems can be performed quite easily was first performed already in 1964 by Johnson with co-authors [2]. However, the probabilities of the annihilation processes with the emission of one and two photons were not compared due to the lack of a satisfactory theoretical description of the two-photon process.

Such description was performed for the very first time in Ref. [3]. Here we improve the approach developed in this work by describing the virtual electron-positron state propagator by the exact Dirac-Coulomb Green function instead of the B-splines finite basic set method [4]. The improved approach allows to extract and subtract the infrared divergences occurring when one of the emitted photons possesses low energy. We apply the developed approach for the calculation of the cross section of the two-quantum annihilation of positrons with K-shell electrons of H-like ions and compare it with one for the single-quantum channel.

1. Drukarev E. G., Mikhailov A. I. High-Energy Atomic Physics / E. G. Drukarev, A. I. Mikhailov, Cham: Springer International Publishing, 2016.
2. Johnson W. R., Buss D. J., Carroll C. O. Single-Quantum Annihilation of Positrons // Physical Review. 1964. № 5A (135). C. A1232–A1235.
3. Zaytsev V. A. [и др.]. Ab initio QED treatment of the two-photon annihilation of positrons with bound electrons // Physical Review Letters. 2019. № 9 (123). C. 093401.
4. Johnson W. R., Blundell S. A., Sapirstein J. Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines // Physical Review A. 1988. № 2 (37). C. 307–315

Determination of the M1 transition probability between the isomeric and ground nuclear states of ^{229}Th from the ground-state g-factor of H- and Li-like thorium ions

A.M. Ryzhkov, D.A. Glazov, V.M. Shabaev

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

The exceptionally low-energy (about 8 eV) isomeric state in ^{229}Th [1-3] attracts a great interest of atomic and nuclear physics communities [1–3]. The smaller sensitivity of the nuclear transitions to external perturbations, compared to electronic transitions in atoms, makes this nucleus an ideal candidate for the nuclear optical clock which could serve as a new metrological frequency standard [4]. The practical realization of this application requires the precise knowledge of the excitation energy as well as other fundamental nuclear properties of the ground and isomeric states. Among these properties, one should consider the nuclear magnetic moments and the M1 transition probability between the nuclear states. While the excitation energy was measured to an accuracy of about 2% (8.28(17) eV in Ref. [2] and 8.10(17) eV in Ref. [3]) and the magnetic moments of the ground and isomeric states were derived from experiments to precision of about 2% and 16%, respectively [5–7], to date there is no experimental data on the M1 transition probability between these states.

In highly charged ^{229}Th ions, the ground and isomeric states can mix with each other due to strong hyperfine interaction and small energy difference [8–10]. The nuclear hyperfine mixing (NHM) shifts the energies of the hyperfine sublevels and can strongly increase the transition probability between the “up” and “low” states of the ion [9]. The NHM coefficient b , which contains information about the M1 transition probability between the nuclear states, affects also the ground state g factor of the ion. In the present paper, we show that the mixing coefficient can be found with a good accuracy from high precision measurements of the ground state g factor of H- or Li-like thorium ions [11]. For instance, the experimental determination of the ground-state g factor of H-like ^{229}Th ion to the precision of about 10^{-7} allows one to get the NHM mixing coefficient b to an accuracy of about 10^{-3} . Then using this coefficient and the experimental value of the nuclear excitation energy one can find the nuclear M1 transition probability with a few percent accuracy. Furthermore, combining the measurements of the g factor of H- and Li-like ^{229}Th ions allows to improve the accuracy of b and determine the nuclear magnetic moment to a higher accuracy than that of the currently accepted value.

1. B. R. Beck, J. A. Becker, P. Beiersdorfer, G. V. Brown, K. J. Moody, J. B. Wilhelmy, F. S. Porter, C. A. Kilbourne, and R. L. Kelley, *Phys. Rev. Lett.* 98, 142501 (2007).
2. B. Seiferle, L. von der Wense, P. V. Bilous, I. Amersdorffer, Ch. Lemell, F. Libisch, S. Stellmer, Th. Schumm, Ch. E. Düllmann, A. Pálffy, and P. G. Thirolf, *Nature* 573, 243 (2019).
3. T. Sikorsky, J. Geist, D. Hengstler, S. Kempf, L. Gastaldo, Ch. Enss, Ch. Mokry, J. Runke, Ch. E. Düllmann, P. Wobrauschek, K. Beeks, V. Rosecker, J. H. Sterba, G. Kazakov, Th. Schumm, and A. Fleischmann, *Phys. Rev. Lett.* 125, 142503 (2020).
4. E. Peik and C. Tamm, *Europhys. Lett.* 61, 181 (2003).
5. C. J. Campbell, A. G. Radnaev, and A. Kuzmich, *Phys. Rev. Lett.* 106, 223001 (2011).
6. M. S. Safronova, U. I. Safronova, A. G. Radnaev, C. J. Campbell, and A. Kuzmich, *Phys. Rev. A* 88, 060501 (2013).
7. J. Thielking, M. V. Okhupkin, P. Glowacki, D. M. Meier, L. von der Wense, B. Seiferle, Ch. E. Düllmann, P. G. Thirolf, and E. Peik, *Nature* 556, 321 (2018).
8. S. Wycech and J. Zylicz, *Act. Phys. Pol. B* 24, 637 (1993).
9. F. F. Karpeshin, S. Wycech, I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, M. Pfutzner, and J. Zylicz, *Phys. Rev. C* 57, 3085 (1998).
10. E. V. Tkalya and A. V. Nikolaev, *Phys. Rev. C* 94, 014323 (2016).
11. V.M. Shabaev, D. A. Glazov, A.M. Ryzhkov, C. Brandau, G. Plunien, W. Quint, A.M. Volchkova, and D. V. Zinenko, arXiv:2109.01642.

Релятивистский расчёт разности энергий многократной ионизации изотопов Ho-163 и Dy-163

И. М. Савельев, М. Ю. Кайгородов, Ю. С. Кожедуб, И. И. Тупицын, В. М. Шабаев

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Одним из наиболее интересных открытых вопросов в электрослабом секторе Стандартной модели являются абсолютные значения масс нейтрино [1]. В рамках Стандартной модели нейтрино является безмассовой частицей, но современные эксперименты по изучению нейтринных осцилляций показывают, что масса нейтрино отлична от нуля. Однако осцилляционные эксперименты позволяют получить ограничение сверху только на разницу квадратов масс нейтрино разных поколений [2]. Прямую лабораторную оценку для эффективной массы электронного нейтрино можно получить из экспериментов по изучению спектров бета-распада или электронного захвата. В настоящее время она составляет 1.1 эВ для экспериментов в бета-распаде трития [3,4,5] и 225 эВ для экспериментов по электронному захвату [6].

Одним из наиболее перспективных способов понижения лабораторного предела на массу электронного нейтрино являются предложенные несколькими коллаборациями (ECHO, HOLMES, NuMECS) эксперименты по изучению спектра электронного захвата в изотопе Ho-163. Этими коллаборациями планируется сначала достигнуть уровня в 1 эВ, а затем и 0.1 эВ на верхний предел массы нейтрино. Для проведения такого рода эксперимента необходимо заранее знать разницу масс исходного и дочернего атома, однако экспериментально с нужной точностью эту разницу можно определить только для многозарядных ионов [7]. Поэтому возникает необходимость пересчёта разности энергий основных состояний ионов в разность энергий основных состояний нейтральных атомов.

В рамках настоящей работы осуществляются соответствующие вычисления для ионов гольмия и диспрозия с зарядами 30+, 48+ и 56+ методом конфигурационного взаимодействия в базисе орбиталей Дирака-Фока-Штурма [8]. Основным источником погрешности такого расчета является разность энергий нейтральных атомов, поэтому данная величина также вычисляется методом KR-CI с использованием пакета программ DIRAC [9].

1. J. A. Formaggio, A. L. C. de Gouvea, and R. H. Robertson, Phys. Rep. 914, 1 (2021).
2. M. C. Gonzalez-Garcia and Y. Nir, Rev. Mod. Phys. 75, 345 (2003).
3. Ch. Kraus, et al., Eur. Phys. J. C 40, 447 (2005).
4. V. N. Aseev, et al., Phys. Rev. D 84, 112003 (2011).
5. KATRIN Collaboration, M. Aker, K. Altenmuller et al., Phys. Rev. Lett. 123, 221802 (2019).
6. P. T. Springer, C. L. Bennett, and P. A. Baisden, Phys. Rev. A 35, 679 (1987).
7. P. Filianini et al., Phys. Rev. Lett. 127, 072502 (2021).
8. I. I. Tupitsyn, et al., Phys. Rev. A 68, 022511 (2003).
9. T. Saue, R. Bast et al., J. Chem. Phys. 152, 204104 (2020).

Зонная структура спиновых волн в скирмионном кристалле

В.Е. Тимофеев^{1,2}, Д.Н. Аристов^{1,3}

¹НИЦ «КИ» ПИЯФ, Гатчина

²СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

³СПбГУ, Санкт-Петербург

Магнитные скирмионы – закрученные конфигурации локальной намагниченности, обладающие отличным от нуля топологическим зарядом. Интерес к теоретическим исследованиям магнитных скирмионов связан в первую очередь с перспективами их использования в качестве строительных блоков для будущего поколения устройств оперативной памяти [1].

Хорошо известно, что в магнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мории скирмионы упорядочиваются в решётки, образуя т.н. скирмионные кристаллы [2]. Ранее авторами доклада был разработан подход анализа свойств статических многоскирмионных конфигураций. Ключевым аспектом этого подхода было использование метода стереографической проекции, позволяющего описать конфигурацию локальной намагниченности при помощи функции комплексного переменного [3-4].

Настоящая работа посвящена анализу низкоэнергетической динамики спиновых волн в скирмионном кристалле в подходе стереографической проекции. Авторы используют хорошо известный квазиклассический подход для описания небольших, зависящих от времени, отклонений от статической конфигурации, что позволяет им выписать уравнения на нормальные моды таких отклонений. Уравнения по своей структуре напоминают уравнения Боголюбова – де Жена, однако ключевой их особенностью является то, что все потенциалы в этих уравнениях выражены через функцию стереографического образа статической конфигурации.

Трансляционная симметрия скирмионного кристалла позволяет искать решение уравнений в базисе плоских волн и найти дисперсию низколежащих возбуждений в такой системе внутри первой зоны Бриллюэна скирмионного кристалла. Полученная зонная структура существенно отличается от параболической: наравне с дисперсионными ветками в ней есть полностью плоские зоны. Все полученные нормальные моды могут быть проинтерпретированы в терминах волн различных деформаций отдельных скирмионов: дилатационных, эллиптических и т.д.

Известно, что топологические свойства зонных структур в двумерных системах могут играть важную роль в физических процессах (квантовый эффект Холла, возникновение краевых состояний и т.д.). Разработанный авторами формализм позволил проанализировать такие топологические характеристики, как кривизна Берри и числа Черна для зонной структуры спиновых волн в скирмионном кристалле.

1. Koshibae W. et al. Memory functions of magnetic skyrmions //Japanese Journal of Applied Physics. – 2015. – Т. 54. – №. 5. – С. 053001.
2. Bogdanov A., Hubert A. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals //Journal of magnetism and magnetic materials. – 1994. – Т. 138. – №. 3. – С. 255-269.
3. Timofeev V. E., Sorokin A. O., Aristov D. N. Towards an effective theory of skyrmion crystals //JETP Letters. – 2019. – Т. 109. – №. 3. – С. 207-212.
4. Timofeev V. E., Sorokin A. O., Aristov D. N. Triple helix versus skyrmion lattice in two-dimensional noncentrosymmetric magnets //Physical Review B. – 2021. – Т. 103. – №. 9. – С. 094402.

Relativistic calculations of superheavy elements Nihonium (113) and Flerovium (114) electronic structure

D.P. Usov, M.Y. Kaygorodov, I.I. Tupitsyn

*Department of Physics, St.Petersburg State University,
Universitetskaya 7/9, 199034 St.Petersburg, Russia*

Superheavy elements (SHEs) are usually referred to as artificially synthesized elements within the range from rutherfordium (104) following up to the end of the 7th period of the periodic table [1]. The theoretical study of SHEs is of particular interest, due to the growing influence on the electronic structure of two different effects: the relativistic effects, which scale with the nuclear charge number, and the electron correlation effects, which scale with the number of electron pairs. It is expected that owing to the combination of these effects SHEs might have different from their lighter homologous properties [2]. Although, it is a major challenge to study physical and chemical properties of SHEs experimentally, since the elements have short half-lives and low production rates.

One of the most intriguing experimental projects in this field is the construction of Superheavy Elements Factory in Joint Institute for Nuclear Research, Dubna [3]. The project aims to increase the product rate of SHEs in order to make the experimental study of SHEs properties possible. The most available way to study physical and chemical properties of SHEs nowadays remains a theoretical calculations within the framework of the relativistic quantum mechanics.

In present work the electron affinity (EA) and ionization potentials (IPs) were calculated for superheavy elements Nihonium (113) and Flerovium (114) using the relativistic Fock-space couple cluster method with single and double excitations. A special procedure, which minimizes the uncertainty associated with the choice of the basis set, was applied. For the first time, the contribution to the EA and IPs from the triple excitations was evaluated in the full iterative manner using the EXP-T package [4]. The influence of the relativistic effects on the EA and IPs was studied through comparison with the related results obtained within the non-relativistic framework. The results for the electronic structure properties of Nihonium and Flerovium were compared with their lighter homologous as well.

1. Y. T. Oganessian, A. Sobiczewski, G. M. Ter-Akopian, *Phys. Scr.* 92, 023003 (2017).
2. E. Eliav, S. Fritzsche, U. Kaldor, *Nucl. Phys. A* 944, 518 (2015).
3. S. Dmitriev, M. Itkis, Yu. Oganessian, *EPJ Web Conf.* 131, 08001 (2016).
4. A. V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, L. V. Skripnikov, E. Eliav, *Symmetry* 12, 1101 (2020).

Вариант перенормировки четырехмерной квантовой теории Янга—Миллса

А. В. Иванов^{1,2}, Н. В. Харук^{1,2,3}

¹*Санкт-Петербургское отделение Математического института В.А.Стеклова РАН, Санкт-Петербург*

²*Международный математический институт им. Леонарда Эйлера, Санкт-Петербург*

³*Университет ИТМО, Санкт-Петербург*

Теория Янга—Миллса, впервые изложенная в работе [1], занимает особое место в теоретической физике. Эта калибровочная теория с неабелевой калибровочной группой позволила описать квантовую хромодинамику и электрослабые взаимодействия, тем самым легла в основу “Стандартной модели” и привела к значительному продвижению в построении единой теории поля.

Как и в других моделях квантовой теории поля, при петлевом разложении в теории Янга—Миллса возникают расходящиеся величины, которые требуют перенормировки. Для этого могут быть выбраны различные схемы регуляризации. Одними из самых распространенных являются размерная регуляризация, регуляризация высшими производными, а также с импульсом обрезания. Первые две схемы позволяют достаточно легко получить многопетлевое разложение, тогда как для последней известна только первая поправка.

В данной работе [2] мы приводим явную процедуру регуляризации с импульсом обрезания и выполняем двухпетлевую перенормировку четырехмерного квантового действия теории Янга—Миллса, используя сценарий из [3, 4]. Мы показываем, что вторая поправка содержит сингулярности только логарифмического типа в первой степени. Также был получен второй коэффициент бета-функции. Мы проводим исследование этого коэффициента как функционала семейства сдвигов и показываем, что значение второй поправки совпадает с результатом, полученным в случае размерной регуляризации.

Работа выполнена за счет гранта в форме субсидий из федерального бюджета на создание и развитие международных математических центров мирового уровня, соглашение между МОН и ПОМИ РАН № 075-15-2019-1620 от 8 ноября 2019 г.

1. Yang C. N., Mills R. L., Phys. Rev. 96, 191–5 (1954)
2. Ivanov A. V., Kharuk N. V., Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 48 1, 015002, (2020)
3. Faddeev L. D., Int. J. Mod. Phys. A 31, 1630001 (2016)
4. Derkachev C. E., Ivanov A. V., Faddeev L. D., Theor. Math. Phys. 192, 1134–40 (2017)

Щель в спектре магнонов и спиновый резонанс в антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией типа “лёгкая плоскость” в наклонном поле

А.С. Щербаков¹, О.И. Утёсов^{1,2}

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

² Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

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

Квантовый магнетик $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$, сокращенно называемый DTN (dichloro - tetrakis-thiourea-nickel), является объектом многочисленных исследований [1,2,3]. Это вещество образует объемноцентрированную тетрагональную решетку с четкой иерархией констант обменного взаимодействия. Самым сильным оказывается обмен вдоль оси тетрагональной решетки, делая DTN квазиодномерным объектом. При низких температурах и наличии внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси с тетрагональной решетки, DTN испытывает последовательно два квантовых фазовых перехода. Первый переход из парамагнитной фазы, обусловленной сильной одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», в антиферромагнитную фазу (АФ), второй переход из АФ в полностью поляризованную фазу.

Интерес к DTN обусловлен тем, что оно является удобным объектом для исследований влияния беспорядка на свойства магнетиков, т.к. легирование этого вещества атомами брома приводит к частичной замене атомов хлора без ощутимых изменений межатомных расстояний и искажений решетки.

В прошлой работе [4] мы исследовали спектр элементарных возбуждений в магнитоупорядоченной фазе и объяснили зависимость энергии длинноволновых оптических магнонов в спектре ESR от параметров системы. В данной работе мы исследуем появление щели в спектре магнонов на антиферромагнитном векторе вследствие нарушения вращательной симметрии малым поперечным полем, которое эффективно возникает от малого наклона тетрагональной оси образца относительно внешнего магнитного поля.

Малое поле приводит к появлению поправок к энергии, а также к появлению спин-решеточного взаимодействия, выражающегося в процессах переброса магнонов. Процессы переброса перемешивают магноны с разными импульсами, что приводит к дополнительным вкладам к энергии магнонов.

Теоретическое описание спектра магнонов в магнитоупорядоченной фазе образца DTN, наклоненного относительно внешнего поля, производилось с помощью стандартного бозонного представления Холстейна-Примакова спиновых операторов, $1/S$ разложения и теории возмущений по малому поперечному полю.

Было показано, что учёт квантовых флуктуаций приводит к уменьшению щели в спектре и к качественному изменению поведения среднего значения поперечной компоненты спина как функции внешнего поля. Флуктуации уменьшают значение, а поведение становится не монотонным и отличным от линейной зависимости, как предсказывает линейная теория спиновых волн.

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

1. K. Yu. Povarov, E. Wulf, D. Hüvonen, J. Ollivier, A. Paduan-Filho, and A. Zheludev Phys. Rev. B 92, 024429, 2015
2. Zvyagin S. A. et al. Spin dynamics of $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$ in the field-induced ordered phase Physical Review B. – 2008. – Т. 77. – №. 9. – С. 092413.
3. T. A. Soldatov, A. I. Smirnov, K. Yu. Povarov, A. Paduan-Filho, and A. Zheludev Phys. Rev. B 101, 104410
4. Sherbakov A. S., Utesov O. I. Magnon spectrum and electron spin resonance in antiferromagnet with large single-ion easy plane anisotropy //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2021. – Т. 518. – С. 167390.

Анализ роли гена *OL11/HOS15* в регуляции длины теломер растений *Arabidopsis thaliana*

И.А. Агабекян¹, А.Ю. Люшиненко¹, Л.Р. Валеева¹, Л.Р. Абдулкина¹, Е.В. Шакиров^{1,2}

¹ – Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

² - Университет Маршалл, Хантингтон, США

Теломеры – это естественные концы эукариотических хромосом, которые защищают их от прогрессирующего укорочения и ошибочного распознавания в качестве хромосомных разрывов. Интерес к биологии теломер вытекает главным образом из взаимосвязи между функциями теломер, механизмами старения организма и генезисом тяжелых заболеваний человека. Теломерная ДНК состоит из множества коротких нуклеотидных повторов. Известно, что определенное количество теломерных повторов, полученное при рождении, изначально предопределяет способность большинства соматических клеток к пролиферации [Prochazkova et al., 2019]. Таким образом, начальная длина теломер — это наиболее аккуратный клеточный маркер биологического возраста. Главная задача наших исследований - поиск и анализ генетических факторов, ответственных за установление и регуляцию видоспецифичной длины теломер модельных растений *Arabidopsis thaliana*.

Проведенные нами ранее предварительные эксперименты по изучению длины теломер в рекомбинантной инбредной популяции MAGIC *Arabidopsis thaliana* позволили идентифицировать важный ген-кандидат *OLI2/NOP2A*, контролирующий длину теломер [Abdulkina et al., 2019]. Ген *OLI2/NOP2A* ранее был также идентифицирован как часть генетического пути *OLIGOCELLULA* [Fujikura et al., 2009]. Несколько генов этого пути также участвуют в регуляции длины теломер растений, в частности, гены *OLI5/RPL5A* и *OLI7/RPL5B*. Однако вклад остальных генов *OLIGOCELLULA* в регуляцию длины теломер, в частности, гена *OL11/HOS15*, играющего важную роль в регуляции экспрессии генов акклиматизации растений к холоду, ранее не изучался.

Таким образом, целью данной работы являлось изучение влияния гена *OL11/HOS15* на регуляцию длины теломер в *A. thaliana*. Для исследования влияния гена на длину теломер были получены мутантные растения с Т-ДНК вставкой в исследуемом гене из коллекции GABI, и гомозиготные растения по мутации в гене *OL11/HOS15* были выращены в трех последовательных поколениях. Измерение длины теломер проводили с помощью Саузерн блоттинга путем гибридизации рестрицированной с помощью *Tru11* геномной ДНК с меченой с 5'-конца DIG – теломерной пробой. Анализ гомозиготных мутантов по гену *OL11/HOS15* в трех последовательных поколениях показал, что длина теломер поздних поколений мутантных растений резко увеличивалась на 1 тыс. пар оснований. Таким образом, по предварительным данным, ген *OL11/HOS15* является отрицательным регулятором длины теломер растений *Arabidopsis thaliana*.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-14-00147)

1. Abdulkina, L.R. Components of the ribosome biogenesis pathway underlie establishment of telomere length set point in *Arabidopsis* / L.R. Abdulkina, C. Kobayashi, J.T. Lovell, I.B. Chastukhina, B.A. Behailu, I.A. Agabekian, A.V. Suescún, L.R. Valeeva, C. Nyamsuren, G.V. Aglyamova, M. R. Sharipova, D.E. Shippen, T.E. Juenger and E.V. Shakirov // Nat Commun. – 2019. – V.10. – P.5479.
2. Fujikura, U. Coordination of cell proliferation and cell expansion mediated by ribosome-related processes in the leaves of *A. thaliana* / U. Fujikura, G. Horiguchi, M.R. Ponce, J.L. Micol, H. Tsukaya // Plant J. – 2009. – V. 59.- I. 3. – P. 499-508.
3. Prochazkova Schruppfova P, Fojtova M, Fajkus J. Telomeres in Plants and Humans: Not So Different, Not So Similar. Cells. 2019;8(1):58. Published 2019 Jan 16. doi:10.3390/cells8010058

Гены *HIM1* и *HSM3* контролируют активность TLS ДНК-полимеразы η дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*

Е.А. Алексеева^{1,2}, Т.А. Евстюхина^{1,2}, Д.В. Федоров¹, В.Т. Пешехонов^{1,2}, В.Г. Королев^{1,2}

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

² «Курчатовский геномный центр – ПИЯФ»

Гены *HIM1* и *HSM3* дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* принадлежат к *HSM3* - эпистатической группе. Данная группа генов была выделена по признаку повышенного спонтанного и УФ-индуцированного мутагенеза у их мутантов. К *HSM3* - эпистатической группе относятся четыре гена *HMO1*, *HSM6*, *HIM1* и *HSM3*. В нашем исследовании мы рассматривали два последних гена.

Ген *HIM1* участвует в контроле безошибочной ветви Толерантности к повреждению ДНК, продукт данного гена, белок Him1 стабилизирует D-петли и регулирует экспрессию гена *RNR3*, продукт которого является субъединицей рибонуклеотид редуктазного комплекса RNR (состоящего из четырех субъединиц Rnr1, Rnr3, Rnr2 и Rnr4), ответственного за синтез дезоксирибонуклеотидтри фосфатов [1].

Ген *HSM3* участвует в контроле некоторых второстепенных процессов репарации в клетке. Также недавно было показано, что белок Hsm3, продукт гена *HSM3*, выполняет роль шаперона и участвует в сборке протеосом [2], недавно было показано, что он также входит в состав гистонацетилазного комплекса NuB4 и участвует в стабилизации D-петли [3].

Мы предположили, что высокая частота УФ-индуцированного мутагенеза у штаммов *him1Δ* и *hsm3Δ*, связана со сменой полимераз, в результате преждевременного разрушения D-петли, и заполнения незавершенной бреши ошибочной полимеразой. На эту роль подходит TLS ДНК-полимераза η .

Полимераза η работает на ошибочном пути Толерантности к повреждению ДНК, или как его еще называют синтезе через повреждение ДНК (TLS (TransLesion Synthesis)). Она относится к Y семейству TLS ДНК-полимераз и кодируется геном *RAD30* [4]. Полимераза η примечательна тем, что способна осуществлять эффективный синтез ДНК на матричной цепи, содержащей димеры пиримидина, которые образуются в результате воздействия УФ-света [5]. Димеры пиримидина чаще всего образуются, в так называемых бипиримидиновых сайтах. В данном случае полимеразы η работает практически безошибочно, вставляя напротив димеров пиримидина два аденина. При этом в небипиримидиновых сайтах она работать не должна.

Чтобы посмотреть работу полимеразы η в небипиримидиновых сайтах после облучения соответствующих штаммов *him1Δ*, *hsm3Δ* (когда полимеразы η работает), и *him1Δ rad30Δ*, *hsm3Δ rad30Δ* (когда полимеразы η не работает), мы определили спектры мутаций в локусе *CAN1*. Для этого были выделены мутанты *can^R* после УФ-облучения при дозе 84 Дж/м² [1, 3].

Полученные нами спектры мутаций в небипиримидиновых сайтах для *him1Δ* (21×10^{-5}) и *hsm3Δ* (19×10^{-5}) практически не отличались, при этом у двойных мутантов с «выключенной» полимеразой η в этих же сайтах наблюдалось значительное снижение частоты спектра мутаций для *him1Δ rad30Δ* (1×10^{-5}) и для *hsm3Δ rad30Δ* [1, 3].

Исходя из этого, можно сделать вывод о том, что повышенный УФ-индуцированный мутагенез у мутантов по генам *HIM1* и *HSM3* связан с работой полимеразы η , и, что продукты данных генов вовлечены в контроль её активности.

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

1. Alekseeva E.A. Participation of the *HIM1* gene of yeast *Saccharomyces cerevisiae* in the error-free branch of post-replicative repair and role Pol η in *him1*-dependent mutagenesis / Alekseeva E.A., Evstyukhina T.A., Peshekhonov V.T., [et al] // Curr Genet., 2021. -V.67. -№1. -P.141-151. doi: 10.1007/s00294-020-01115-6

2. Takagi K., Kim S., Yukii H., Ueno M., R. Morishita R., Endo Y., Kato K., Tanaka K., Saeki Y., Mizushima T. Structural basis for specific recognition of Rpt1, an ATPase subunit of the 26S proteasome, by a proteasome-dedicated chaperone Hsm3. J. Biol. Chem. 2012, 287, 12172-12182. doi: 10.1074/jbc.M112.345876

3. Evstyukhina T.A. Genetic Analysis of the Hsm3 Protein Function in Yeast *Saccharomyces cerevisiae* NuB4 Complex / Evstyukhina T.A., Alekseeva E.A., Fedorov D.V., [et al] // Genes, 2021. -V.12. - №1083. doi: 10.3390/genes12071083

4. Bienko M. Ubiquitin-binding domains in Y-family polymerases regulate translesion synthesis / Bienko M., Green C.M., Crosetto N., [et al] // Science, 2005. -V. 310. -№5755. -P. 1821-1824. doi: 10.1126/science.1120615

5. Johnson R.E., Prakash S., Prakash L. Efficient bypass of a thymine-thymine dimer by yeast DNA polymerase Pol η / Johnson R.E., Prakash S., Prakash L. // Science, 1999. -V.283. -№5404. -P.1001-1004. doi: 10.1126/science.283.5404.1001

Спонтанная полиплоидизация гаплоидных гетероталлических дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*

Ю.В. Андрейчук¹, А.С. Жук², Е.Р. Тараховская^{1,3}, Е.И. Степченко^{1,3}, С.Г. Инге-Вечтомов^{1,3}

¹СПб филиал Института общей генетики им. Н.И. Вавилова РАН, Санкт-Петербург

²Университет ИТМО, Санкт-Петербург

³Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Полиплоидизацию, представляющую собой кратное увеличение полного набора хромосом, часто рассматривают как геномную мутацию. Выделяют автополиплоидизацию и аллополиплоидизацию. При автополиплоидизации после репликации хромосом деление клетки не завершается, в результате чего все хромосомы остаются в одной не поделившейся клетке. При аллополиплоидизации удвоение генома происходит за счет слияния геномов двух особей одного или разных видов. Полиплоидизация имеет важное биологическое значение. Множественная дупликация генома часто встречается в секреторных клетках, клетках, подвергшихся токсическим и механическим повреждениям или вирусным инфекциям [1]. Предполагают, что полиплоидизация приводит к развитию раковых опухолей, а также способствует приобретению устойчивости раковых опухолей к лекарственным препаратам [2]. Полиплоидные виды широко распространены в природных популяциях. Следы множественной дупликации генома, а также аллополиплоидизации, происходивших на разных этапах эволюции, несут в своем геноме многие виды растений, животных и микроорганизмов [3].

Все виды, размножающиеся половым путем, имеют гаплоидную и диплоидную стадии жизненного цикла. Многие представители различных таксономических групп большую часть жизненного цикла существуют в диплоидной стадии, у позвоночных гаплоидная стадия представлена стадией гамет. Гетероталлические штаммы дрожжей *S. cerevisiae*, используемые в лабораторных исследованиях, способны существовать в гаплоидном состоянии длительное время, поэтому они являются идеальным модельным объектом для изучения полиплоидизации (дупликации в случае гаплоидного генома *S. cerevisiae*). Тем не менее, изучение полиплоидизации и количественное определение темпа полиплоидизации затруднены ввиду низкой частоты этого события и отсутствия селективных генетических маркеров, позволяющих фенотипически различить гаплоиды и диплоиды. Частота и темп спонтанной полиплоидизации у дрожжей долгое время оставались неизвестны. В 2018 г. Harari et al., [4] определили частоту полиплоидизации с использованием математического моделирования и статистических методов в длительных эволюционных экспериментах. В данной работе мы впервые напрямую определили темп спонтанной полиплоидизации в ночных культурах дрожжей *S. cerevisiae*.

В нашей работе для определения частоты полиплоидизации у дрожжей мы применили подход, позволяющий на первом этапе фенотипически различать гаплоиды и полиплоиды (диплоиды) по частоте возникновения рецессивных мутаций, индуцированных ультрафиолетовым светом [5,6], с последующим подтверждением пloidности с помощью проточной цитометрии.

Для определения темпа полиплоидизации мы проанализировали в среднем по 1500 колоний в 6 независимых культурах (всего 9266 колоний), среди которых 48 оказались немутирующими под действием УФ-излучения. Дальнейший анализ количества ДНК в отобранных клонах с помощью проточной цитометрии показал, что 39 клонов оказались диплоидными, 1 тетраплоидным, остальные 8 гаплоидными. Учитывая только подтвержденные полиплоиды (диплоиды и тетраплоид) мы определили скорость мутирования в каждой из 6 культур. По нашим данным медиана и 95% доверительный интервал темпа полиплоидизации составили 6.2×10^{-5} ($5.1 \times 10^{-5} - 36.4 \times 10^{-5}$).

Появление диплоидных клеток в гаплоидной культуре возможно в результате двух различных процессов – автодупликации генома и скрещивания двух гаплоидных клеток с образованием диплоидного гибрида. Для того чтобы оценить частоты этих двух процессов, были определены типы спаривания отобранных полиплоидов. Гаплоидные клетки *S. cerevisiae* обладают типом спаривания α или a , детерминированным последовательностью локуса *MAT* (*MATa* определяет α тип спаривания, *MATa* – a тип спаривания). Клетки, обладающие противоположными типами спаривания, могут скрещиваться между собой, образуя нескрещивающийся (n/m – non-mating) диплоид *MATa/MATa*. Диплоиды, образовавшиеся в результате автодупликации генома, гомозиготны по последовательности локуса *MAT* и обладают таким же типом спаривания, что и гаплоидный штамм, из которого они образовались. Гибридные диплоиды, образуемые в результате слияния двух клеток с противоположными типами спаривания, гетерозиготны по локусу *MAT* и не скрещиваются (n/m). Из 39 отобранных диплоидов 38 имели тип спаривания α , 1 был n/m , тетраплоид имел a тип спаривания. Кроме того, частота гибридилизации в культуре гетероталлических штаммов дрожжей известна и составляет $\approx 10^{-6}$, что значительно ниже значения полученного в нашей работе [7,8].

Учитывая полученные в данной работе результаты, мы пришли к заключению, что диплоидизация в гаплоидных культурах происходит преимущественно в результате автодупликации генома. Данный вывод согласуется с опубликованными ранее данными (Harari et al., 2018)

Работа Андрейчук Ю.В. поддержана грантом РФФИ № 20-34-90040. Работа Жук А.С. выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации в рамках программы ИТМО Fellowship and Professorship Program.

1. Gentric G, Desdouets C. Polyploidization in liver tissue. *Am J Pathol.* 2014 Feb;184(2):322-31. doi: 10.1016/j.ajpath.2013.06.035.
2. Davoli T, de Lange T. The causes and consequences of polyploidy in normal development and cancer. *Annu Rev Cell Dev Biol.* 2011;27:585-610. doi: 10.1146/annurev-cellbio-092910-154234.
3. Meyer A, Schartl M. Gene and genome duplications in vertebrates: the one-to-four (-to-eight in fish) rule and the evolution of novel gene functions. *Curr Opin Cell Biol.* 1999 Dec;11(6):699-704. doi: 10.1016/s0955-0674(99)00039-3.
4. Harari Y, Ram Y, Rappoport N, Hadany L, Kupiec M. Spontaneous Changes in Ploidy Are Common in Yeast. *Curr Biol.* 2018 Mar 19;28(6):825-835.e4. doi: 10.1016/j.cub.2018.01.062.
5. Schild D, Ananthaswamy HN, Mortimer RK. An endomitotic effect of a cell cycle mutation of *Saccharomyces cerevisiae*. *Genetics.* 1981 Mar-Apr;97(3-4):551-62. doi: 10.1093/genetics/97.3-4.551.
6. Sharp NP, Sandell L, James CG, Otto SP. The genome-wide rate and spectrum of spontaneous mutations differ between haploid and diploid yeast. *Proc Natl Acad Sci USA.* 2018 May 29;115(22):E5046-E5055. doi: 10.1073/pnas.1801040115.
7. Repnevskaya, M.V., Karpova, T.S. & Inge-Vechtomov, S.G. Hybridization and cytoduction among yeast cells of the same mating type. *Curr Genet* 12, 511–517 (1987). <https://doi.org/10.1007/BF00419560>.
8. Коченова О.В., Сошкина Ю.В., Степченко Е.И., Инге-Вечтомов С.Г., Щербак П.В. Участие ДНК-полимераз репликативного обхода повреждений в поддержании целостности хромосом у дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* Биохимия. 2011. Т. 76. № 1. С. 62-75.

Состав микробиома мокроты у пациентов с плоскоклеточным раком легкого

Е.Д. Баранова

Кемеровский государственный университет, Кемерово

Рак лёгкого (РЛ) ежегодно диагностируется примерно у 1,2 миллиона человек во всем мире, и за этот период от него умирает более 1 миллиона больных [1]. Хотя все формы рака легких происходят из эпителиальных клеток слизистой оболочки дыхательных путей, современная патоморфологическая классификация РЛ включает несколько различных вариантов этого заболевания [2]. РЛ обычно делят на мелкоклеточный рак легкого и немелкоклеточный рак легкого, на долю которого приходится 85% всех бронхогенных опухолей [3]. Немелкоклеточный рак легкого подразделяется на крупноклеточный рак легкого, аденокарциному легкого и плоскоклеточный рак легкого (ПРЛ). На ПРЛ приходится около 30% всех случаев немелкоклеточного рака легкого. Уровень смертности от ПРЛ остается высоким, из-за отсутствия ранней диагностики и диагностических биомаркеров, в том числе метагеномных. Результаты исследований последних лет показывают, что микробиом легких может оказывать значительное влияние на развитие РЛ, вызывая воспалительные реакции, дисбиоз и повреждения ДНК в клетках организма-хозяина. Однако до сих пор лишь в очень немногих исследованиях изучалась взаимосвязь между микробиомом дыхательных путей и отдельными гистологическими формами рака легких.

Целью данного исследования является поиск бактериальных биомаркеров плоскоклеточного рака легких в мокроте. Использование мокроты, хотя и не отражает микробиом какой-либо конкретной части дыхательных путей, может быть очень полезным в качестве метагеномного маркера, поскольку не требует сложных инвазивных процедур.

В ходе исследования таксономический состав микробиома мокроты был изучен у 40 мужчин с диагностированным ПРЛ и у 40 мужчин не имеющих каких-либо легочных заболеваний.

Для определения таксономического состава респираторного микробиома было использовано NGS секвенирование переменных регионов V3–V4 гена 16S рРНК, на приборе Illumina MiSeq.

В результате проведенного исследования не было обнаружено различий в альфа-разнообразии между группой больных ПРЛ и контрольной группой. Между тем различия в структуре бактериальных сообществ (бета-разнообразии) между пациентами и контрольной группой были значимы (pseudo - F = 1,65; p = 0,026). У пациентов с ПРЛ по сравнению с контрольной группой значительно выше представительство родов *Streptococcus*, *Bacillus*, *Gemella* и *Haemophilus*, в то время как 19 других родов бактерий были представлены значительно меньше, что указывает на снижение бета-разнообразия в микробиоме пациентов с ПРЛ. Вид *Streptococcus agalactiae* является наиболее вероятным биомаркером ПРЛ.

Исследование поддержано грантом РФФИ № 18–14–00022П

1. Cheng, T.Y. et al. The International Epidemiology of Lung Cancer: Latest Trends, Disparities, and Tumor Characteristics. // J. Thorac. Oncol. 2016. Т. 11. С.1653-1671.
2. Tsao, M.S., Yoon, J.Y. The eighth TNM classification for lung cancer-What is next? // Lung Cancer. 2018. Т. 121. С. 97-98.
3. Molina, J.R. et al. Non-small cell lung cancer: epidemiology, risk factors, treatment, and survivorship. // Mayo Clin. Proc. 2008. Т. 83. С. 584-594.

Ассоциация активности лизосомных ферментов, вовлеченных в метаболизм церамида, с концентрацией белка альфа-синуклеина при болезни Паркинсона, ассоциированной с мутациями в гене *GBA*

Башарова К.С.¹, Безрукова А.И.¹, Богданова Д.А.¹, Сенкевич К.А.^{1,2}, Грачева Е.В.⁴, Миллюхина И.В.^{2,4}, Байдакова Г.В.⁵, Захарова Е.Ю.⁵, Пчелина С.Н.^{1,2,3}, Усенко Т.С.^{1,2}

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

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

³Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

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

⁵Медико-генетический научный центр имени академика Н.П. Бочкова, Москва, Россия

Болезнь Паркинсона (БП) – это распространенное нейродегенеративное заболевание, которое характеризуется гибелью дофаминергических нейронов в черной субстанции головного мозга. Последние данные указывают на роль нарушения метаболизма церамида в молекулярном механизме БП посредством его участия в деградации белка альфа-синуклеина, который является ключевым звеном в патогенезе БП [1]. Мутации в гене *GBA*, кодирующем лизосомный фермент глюкоцереброзидазу (GCase), вовлеченном в метаболизм церамида, являются генетическим фактором высокого риска БП [2]. При этом молекулярный механизм, приводящий к развитию БП у носителей мутаций в гене *GBA*, остается неизвестным. Мы предполагаем, что помимо дисфункции GCase, дисфункция других лизосомных ферментов, участвующих в метаболизме церамида, таких как альфа-галактозидаза (GLA) и кислая сфингомиелиназа (ASMase), может приводить к накоплению белка альфа-синуклеина у носителей мутаций в гене *GBA*.

Цель исследования заключалась в оценке ассоциации активности лизосомных ферментов с концентрацией белка альфа-синуклеина у пациентов с GBA-БП, бессимптомных носителей мутаций в гене *GBA* (GBA-носителей), а также пациентов со спорадической формой БП и неврологически здоровых индивидуумов (контрольная группа).

В исследование были включены 15 пациентов с GBA-БП, 16 GBA-носителей, 163 пациентов со сБП и 159 индивидуумов контрольной группы. Относительные уровни мРНК генов *GBA*, *GLA* и *SMPD1* оценивали в CD45+ клетках, выделенных из периферической крови методом магнитного ручного сортирования (Miltenyi Biotec, США), с помощью ПЦР в реальном времени с использованием флуоресцентных зондов TaqMan. В качестве референсных генов были использованы гены *GNB2L1* и *ACTB*. Активность лизосомных ферментов, которые кодируются генами *GBA*, *GLA* и *SMPD1* (GCase, GLA, ASMase, соответственно) и концентрация их субстратов (гексозилсфингозин (HexSph) (глюкозилсфингозин (GlcSph) + галактозилсфингозин (GalSph)), глоботриаозилсфингозин (LysoGb3) и лизосфингомиелин (LysoSM), соответственно) измерялась методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрией (ВЭЖХ-МС/МС) в сухих пятнах крови. Уровень альфа-синуклеина определяли методом иммуноферментного анализа (ELISA) (Invitrogen, США).

Активность GCase была статистически значимо снижена у пациентов с GBA-БП и GBA-носителей по сравнению с пациентами со сБП ($p < 0.0001$) и контролем ($p < 0.01$) и сопровождалась увеличением концентрации HexSph у пациентов с GBA-БП и GBA-носителей по сравнению с пациентами со сБП ($p < 0.001$) и контрольной группой ($p < 0.05$). При этом статистически значимых различий в уровне мРНК гена *GBA* между всеми группами выявлено не было ($p > 0.05$). Сниженная активность ASMase наблюдалась в группах пациентов с GBA-БП и GBA-носителей по сравнению с пациентами со сБП ($p = 0.002$, $p < 0.00001$, соответственно) и у GBA-носителей по сравнению с контролем ($p = 0.002$). Интересно отметить, что концентрация LysoSM была снижена у GBA-носителей по сравнению со всеми исследуемыми группами ($p < 0.05$) и у пациентов с БП по сравнению с контролем ($p = 0.02$). Статистических значимых различий в уровне мРНК гена *SMPD1* между всеми группами выявлено не было ($p > 0.05$). Также не было выявлено статистически значимых различий в уровне мРНК гена *GLA*, активности фермента GLA и концентрации LysoGb3 между всеми группами ($p > 0.05$).

Концентрация белка альфа-синуклеина была повышена у GBA-носителей по сравнению с контролем ($p = 0.02$). С помощью корреляционного анализа была выявлена отрицательная корреляция между относительным уровнем мРНК гена *GBA* и уровнем белка альфа-синуклеина ($r = -0.59$, $p = 0.04$) и между активностью GCase и уровнем белка альфа-синуклеина ($r = -0.36$, $p = 0.04$) при БП. Положительная корреляция была показана между концентрацией LysoSM и уровнем белка альфа-синуклеина у GBA-носителей ($r = 0.80$, $p = 0.003$). Также положительная корреляция была обнаружена между активностями лизосомных ферментов GCase и GLA в группе GBA-носителей ($r = 0.56$, $p = 0.03$), между ASMase и GLA ($r = 0.21$, $p = 0.02$) при БП и между ASMase и GCase в контрольной группе ($r = 0.35$, $p < 0.0001$).

Результаты, полученные в ходе данного исследования, подтверждают выводы предыдущих исследований, предполагая роль фермента GCase в патогенезе GBA-БП. Однако, мы также выявили, что снижение активности лизосомных ферментов, в частности ASMase, может играть роль в патогенезе GBA-БП. Мы предполагаем возможное функциональное взаимодействие ферментов ASMase и GCase, которое может влиять на накопление альфа-синуклеина при БП.

Исследование поддержано грантом РФФИ № 19-15-00315.

1. Paciotti S., Albi E., Parnetti L., Beccari T. Lysosomal Ceramide Metabolism Disorders: Implications in Parkinson's Disease // Journal of Clinical Medicine. 2020.

2. Emelyanov A. K., Usenko T. S., Tesson C., Senkevich K. A., Nikolaev M. A., Miliukhina I. V., Kopytova A. E., Timofeeva A. A., Yakimovsky A. F., Lesage S., Brice A., Pchelina S. N. Mutation analysis of Parkinson's disease genes in a Russian data set // Neurobiology of Aging. 2018. (71). С. 267.e1-267.e10.

Транскриптомный профиль лимфоцитов периферической крови пациентов с тяжелым течением COVID-19

*А.И. Безрукова¹, Т.С. Усенко^{1,2}, И.Н. Власов³, А.А. Пантелева¹, К.С. Башарова¹,
Е.Г. Гаврилова², И.В. Шлык², В.В. Мирошникова^{1,2}, М.И. Шадрина^{1,3}, Ю.С. Полушин², П.А.
Сломинский³, С.Н. Пчелина^{1,2}*

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

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

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

Коронавирусная инфекция (COVID-19) — это контагиозное инфекционное заболевание, вызванное тяжелым острым респираторным синдромом, коронавирусом 2 (SARS-CoV-2), оказало катастрофическое влияние на мировую демографию, в результате чего во всем мире умерло более 2.9 миллиона человек [1]. Несмотря на многочисленность исследований, посвященных изучению патогенеза COVID-19, остается еще множество вопросов, в частности, от чего зависит летальный исход при инфицировании вирусом SARS-CoV-2 [2, 3]. Предполагается, что тяжесть течения COVID-19 может определяться индивидуальными особенностями организма, в том числе как геном клеток крови человека отвечает на вирусную нагрузку.

Цель данного исследования заключалась в выявлении особенностей профиля экспрессии генов в лимфоцитах периферической крови у пациентов с COVID-19 с тяжелым течением заболевания.

В исследование было включено 8 пациентов мужского пола, инфицированных SARS-CoV-2. Забор периферической венозной крови проводили на момент поступления в реанимацию до начала лечения. Исход заболевания отслеживался в течение 30 дней. Пациенты были поделены на две группы в зависимости от исхода заболевания (5 пациентов выживших, 3 пациента с летальным исходом). Полнотранскриптомный анализ проводился в лимфоцитах периферической крови, выделенных из цельной венозной крови, методом градиентного центрифугирования в растворе плотности фиколл ($p=1.077$). Тотальная РНК выделялась из лимфоцитов периферической крови при помощи реагента Trisol (Thermo Fisher Scientific). Качество и количество выделенной тотальной РНК проверяли на приборе BioAnalyser и набора RNA 6000 Nano Kit (Agilent). Далее тотальная РНК использовалась для получения полиА фракции при помощи олигоТ магнитных шариков Dynabeads® mRNA Purification Kit (Ambion) согласно инструкции к набору. Из полиА РНК были приготовлены библиотеки для массового параллельного секвенирования при помощи набора NEBNext® Ultra™ II RNA Library Prep (NEB) и NEBNext® Multiplex Oligos for Illumina® (Index Primers Set 1) в соответствии с инструкцией производителя. Секвенирование проводили на приборе HiSeq1500 (Illumina) с генерацией не менее 10 млн коротких чтений длиной 50 нуклеотидов. Выравнивание полученных прочтений на референсный геном (GRCh38) осуществлялось при помощи программного пакета HISAT2. Анализ дифференциальной экспрессии генов проводился с использованием пакета “DESeq2” (версия 1.10.1) в статистической среде R (версия 4.0.3). Анализ обогащения функциональных групп генов проводили с помощью библиотеки Gene Ontology (GO) (<http://geneontology.org>). Результаты анализа обогащения функциональных групп генов визуализировали в программе Cytoscape 3.6.1.

В результате анализа дифференциальной экспрессии генов лимфоцитов периферической крови пациентов с COVID-19 с различным исходом заболевания (реконвалесценция/летальный исход) было выявлено 866 дифференциально экспрессирующихся генов (ДЭГ) ($p<0.05$). Уровень экспрессии 399 генов был повышен, а 467 генов понижен у пациентов, инфицированных COVID-19, выживших по сравнению с пациентами, инфицированными COVID-19, с летальным исходом. В результате анализа обогащения функциональных групп генов при сравнении пациентов, инфицированных COVID-19, с летальным исходом по сравнению с пациентами, инфицированными COVID-19, выжившими, были выявлены наиболее статистически значимые метаболические процессы такие как, дифференцировка лейкоцитов (GO:0002521), активность рецептора карго-молекул (GO:0038024), активность рецептора липопротеиновых частиц (GO:0030228), положительная регуляция клеточной адгезии (GO: 0045785), активация лейкоцитов (GO: 0045321), а также путь, продукты генов в котором играют важную роль в метаболизме холестерина, активность рецепторов липопротеиновых частиц низкой плотности (GO:0005041), что согласуется с последними данными о роли дисфункции липидного обмена в патогенезе COVID-19 [4, 5]. По результатам анализа обогащения функциональных групп генов в данный путь вошло шесть генов *ABCA2*, *ANXA2*, *CD36*, *LDLR*, *LRP6*, *STAB1*, что составляет 75% генов данного пути. Пациенты из группы с летальным исходом характеризовались повышенной экспрессией 4-х генов *CD36*, *STAB1*, *ANXA2*, *LDLR* по сравнению с пациентами с COVID-19 в период реконвалесценции.

Впервые был проведен анализ транскриптома в лимфоцитах периферической крови пациентов с COVID-19 в отделении интенсивной терапии с последующим летальным исходом по сравнению с пациентами с COVID-19 в период реконвалесценции. В результате данного исследования нами было показано, что летальный исход заболевания от COVID-19 характеризуется активацией пути активности рецепторов липопротеиновых частиц низкой плотности.

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

1. Berekaa MM. Insights into the COVID-19 pandemic: Origin, pathogenesis, diagnosis, and therapeutic interventions. Front Biosci (Elite Ed). 2021;13:117-139.
2. Yuki K, Fujigoi M, Koutsogiannaki S. COVID-19 pathophysiology: A review. Clin Immunol. 2020;215:108427.
3. Ji YL, Wu Y, Qiu Z, et al. The Pathogenesis and Treatment of COVID-19: A System Review. Biomed Environ Sci. 2021;34(1):50-60.
4. Wei X., Zeng W., Su J., Wan H., Yu X., Cao X., Tan W., Wang, H. Hypolipidemia is associated with the severity of COVID-19. J. Clin. Lipidol. 2020, 14(3), 297-304.
5. Sorokin A.V., Karathanasis S.K., Yang Z.H., Freeman L., Kotani K., Remaley A.T. COVID-19-Associated dyslipidemia: Implications for mechanism of impaired resolution and novel therapeutic approaches. FASEB J. 2020, 34(8), 9843-9853.

Молекулярный механизм действия эмфорина, нового белкового ингибитора металлопротеаз

И.М. Бердышев, К.Н. Чухонцева, М.А. Карасева, И.В. Демидюк

ФГБУ Институт молекулярной генетики НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Эмфорин (M4in) - сильный конкурентный медленно связывающийся белковый ингибитор протеаз, недавно обнаруженный у бактерии *Serratia proteamaculans*. Показано, что M4in является прототипом нового семейства белковых ингибиторов протеаз. Природной мишенью M4in является протеализин (PLN), металлопротеаза *S. proteamaculans*. Эмфориноподобные ингибиторы (ЭПИ) и протеализинподобные протеазы (ППП) широко распространены у бактерий и, вероятно, принимают участие во взаимодействии бактерий с высшими организмами, а также в патогенезе и межбактериальной конкуренции [1]. В настоящее время механизм действия ЭПИ не установлен, но его понимание может дать новую информацию, необходимую для выяснения биологической роли пары фермент-ингибитор.

Для изучения молекулярного механизма действия M4in нами был проведен анализ пространственных структур M4in и предшественника PLN, а также анализ последовательностей ЭПИ. На основе полученных данных с использованием метода молекулярного докинга была построена модель комплекса M4in-PLN, которая позволила сформулировать гипотезу о том, что механизм действия M4in отличается от канонического для белковых ингибиторов протеаз “механизма Ласковского”, а ключевым элементом активного центра является остаток Asp70, который хелатирует каталитический цинк фермента, при этом остатки Phe21, Ala22, Phe23 взаимодействуют с субстрат-связывающей областью.

Для проверки этой гипотезы в клетках *E. coli* были получены M4in и его модифицированные варианты с заменой Asp70 на Ala (D70A), Ser (D70S), Asn (D70N) и Glu (D70E), а также с заменой Phe21, Ala22 и Phe23 на Ser (F21S, A22S, F23S) и одновременными заменами Phe21 и Phe23 на Ser (F21S/F23S). Ингибирующая способность очищенных рекомбинантных белков по отношению к PLN была охарактеризована с помощью пептидного субстрата с внутренним тушением флуоресценции 2-аминобензоил-Arg-Ser-Val-Ile-Lys(2,4-динитрофенила) [2].

Было показано, что модификация Asp70 существенно влияет на активность M4in: константы ингибирования (K_i) для D70A и D70S оказались примерно на два порядка выше (~30 нМ), а для D70E и D70N на порядок выше (~5 нМ), чем для M4in (~0,2 нМ). В случае одиночных мутаций F21S, A22S и F23S значительных изменений K_i не было, а двойная мутация F21S/F23S приводила к увеличению K_i на порядок. При этом во всех вариантах, где увеличивалась K_i (D70A, D70S, D70N, D70E, F21S/F23S), характер ингибирования менялся с медленного связывания на классическое.

Таким образом, в функционировании ЭПИ ключевую роль играет остаток Asp, а для эффективного связывания ингибитора с ферментом важны остатки Phe, причем, вероятно, для обеспечения взаимодействия достаточно одного остатка Phe в 21 или 23 положении. Полученные данные демонстрируют, что ЭПИ работают по ранее не описанному для ингибиторов протеаз неканоническому механизму.

1. Chukhontseva K.N., Berdyshev I.M., Safina D.R., Karaseva M.A., Bozin T.N., Salnikov V.V., Konarev P.V., Volkov V.V., Grishin A.V., Kozlovskiy V.I., Kostrov S.V., Demidyuk I.V. The protealysin operon encodes emfourin, a prototype of a novel family of protein metalloprotease inhibitors // International journal of biological macromolecules. 2021. Vol. 169. P. 583-596.
2. Karaseva M.A., Chukhontseva K.N., Lemeskina I.S., Pridatchenko M.L., Kostrov S.V., Demidyuk I.V. An Internally Quenched Fluorescent Peptide Substrate for Protealysin // Scientific reports. 2019. Vol. 9(1). P. 143-152.

Исследование абскопального эффекта протонной терапии в эксперименте *in vivo* на опухолевой модели перевивной опухоли аденокарциномы толстой кишки у мышей.

В.С. Бурдаков^{1,2}, Е.А. Куус³, Т.А. Штам^{1,2}, Н.А. Верлов^{1,2}

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

² *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³ *Медицинский институт Березина Сергея, Санкт-Петербург*

Протонная терапия является одним из самых современных и эффективных видов лучевой терапии. На данный момент разработаны международные протоколы лечения, включающие предписанную дозу, режим фракционирования, объёмы облучения в зависимости от гистологического типа опухоли. Однако возможности увеличения эффективности терапии, в том числе, за счет увеличения радиочувствительности опухолевых клеток и стимуляции не прямых воздействий, остаются актуальными в настоящее время.

В 1953 году Р.Х. Моул впервые описал абскопальный («ab» - вдали от, «scopus» – цель) эффект как радиационно-индуцированный эффект, наблюдаемый «на расстоянии от облучаемого объёма, но в пределах одного и того же организма», при котором уменьшение необлученных опухолевых очагов происходит одновременно с уменьшением опухолей в рамках локализованного лечения [1]. Позднее, благодаря анализу клинического опыта и доклинических моделей, «абскопальный эффект» был представлен как системное последствие облучения на опухолевых образованиях «вне поля облучения». Абскопальный эффект объясняется системным эффектом индуцированным в облучённом организме при локальном воздействии ионизирующего излучения и, как правило, опосредуется формированием иммунного ответа на ткани опухоли. С 1969 по 2014 год было описано только 46 клинических случаев абскопального эффекта. При применении комбинированного подхода, соединяющего лучевую терапию и иммунотерапию, количество описанных случаев возникновения абскопального эффекта заметно увеличилось [2].

Целью представленной работы являлось создание простой животной модели абскопального эффекта, не требующей облучения животных. Для этого, мы оценивали влияние на такие параметры опухолевой модели, как прививаемость, скорость роста и срок жизни мышей, от предварительного введения животным суспензии клеток опухоли, облученных заведомо летальной дозой протонного излучения. В эксперименте использовались самки мышей линии BALB/c в возрасте 3-6 месяцев, масса животных на момент начала эксперимента составляла $20,5 \pm 2$ грамма. Для моделирования опухолевого процесса использовались клетки линии СТ26 (аденокарцинома толстой кишки) вводимые подкожно в количестве 1×10^6 на животное. Животным в экспериментальной группе, за неделю до прививания основной опухоли, была введена суспензия клеток линии СТ26, подвергшихся воздействию заведомо летальной дозы (30Гр) протонного излучения, облучение проводилось на медицинской установке Varian ProBeam (центр лучевой терапии МИБС). В качестве контроля в исследование были добавлены две группы животных, которым так же, за неделю до прививания опухоли, вводили, соответственно, суспензию облученных ксеногенных клеток (A172- глиобластома человека) и суспензию мортализированных циклом последовательных заморозок/разморозок клеток линии СТ26. Описанные группы должны были исключить влияние на изначальную опухолевую модель неспецифической активации иммунитета.

В эксперименте было показано торможение роста опухолевого узла и увеличение выживаемости при предварительном введении животным облучённых клеток по сравнению с животными в контрольных группах. А именно, не смотря на то, что во всех группах прививаемость составила 100%, и до 18 суток после прививания существенные отличия в динамике роста опухолевых узлов отсутствовали, после 18 суток наблюдалась существенное отставание роста опухолей в экспериментальной группе, что привело к значимому увеличению срока жизни и уменьшению риска гибели (hazard ratio = 0.22 по отношению к контрольной группе) животных в экспериментальной группе.

1. Sahoo N. et al. 3D treatment planning system—Varian Eclipse for proton therapy planning // Med. Dosim. 2018. Vol. 43, № 2. P. 184–194.
2. Smith A.R. Vision 2020: Proton therapy // Med. Phys. 2009. Vol. 36, № 2. P. 556–568.

Изучение роли хеликазной активности Cas3 в праймированной адаптации в системе CRISPR-Cas I-E *Escherichia coli*

Н.С. Ваулин¹, А.А. Ширяева^{2,3}, К.В. Северинов^{2,4,5}

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

²Сколковский институт науки и технологий, Москва

³Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург

⁴Институт молекулярной генетики Российской академии наук, Москва

⁵Институт микробиологии Ваксмана, Ратгерский университет, Нью-Джерси

CRISPR-Cas – это прокариотические системы приобретенного иммунитета. Они состоят из CRISPR-кассет и генов *cas*. CRISPR-кассеты состоят из коротких повторов ДНК, разделенных уникальными последовательностями (спейсерами). Системы CRISPR-Cas обеспечивают защиту от мобильных генетических элементов, содержащих последовательности, идентичные или близкие спейсерам (протоспейсерам) [1].

В системе CRISPR-Cas типа I-E *E. coli* CRISPR-кассета транскрибируется, в результате чего образуются короткие молекулы крПНК, каждая из которых содержит один спейсер [2]. Комплекс белков Cas (Cascade) связывает крПНК и распознаёт протоспейсеры [2]. Связывание крПНК с комплементарной ей таргетной (target, T) цепью протоспейсера приводит к формированию R-петли [3]. Цепь протоспейсера с последовательностью, идентичной спейсеру, называется нетаргетной (non-target, NT). Образование R-петли приводит к изменению конформации комплекса Cascade и привлечению АТФ-зависимой DExD/H хеликазы Cas3, содержащей нуклеазный HD-домен [4]. *In vitro* Cas3 вносит односторонний разрыв в NT-цепь протоспейсера, связывается с освободившимся 3'-концом и расплетает ДНК, двигаясь в направлении 3'→5' по NT-цепи по одну сторону от протоспейсера [5, 6]. Раскручивание ДНК сопровождается эндонуклеотическим расщеплением обеих цепей нуклеазным доменом Cas3. Этот процесс называют интерференцией.

Процесс встраивания новых спейсеров в CRISPR-кассету называют адаптацией. Выделяют наивную адаптацию, в ходе которой спейсеры приобретаются из какого-либо участка ДНК впервые, и праймированную адаптацию, в ходе которой спейсеры приобретаются в клетках с активной интерференцией из участков, фланкирующих таргетируемый протоспейсер [7, 8]. Как наивная, так и праймированная адаптация требуют присутствия белков Cas1 и Cas2, образующих комплекс, который осуществляет интеграцию коротких двуцепочечных молекул ДНК (преспейсеров) в CRISPR-кассету в качестве новых спейсеров [9]. Предполагают, что в ходе наивной адаптации преспейсеры образуются благодаря активности нуклеазы RecBCD [10]. В ходе праймированной адаптации на таргетируемом протоспейсере собирается комплекс PAC (primed adaptation complex), состоящий из белков Cas1, Cas2, Cas3 и комплекса Cascade [11]. Благодаря хеликазной активности Cas3, PAC движется по ДНК, выбирая последовательности преспейсеров. Концы преспейсеров, вероятно, образуются благодаря сочетанию нуклеазной активности Cas3 и других клеточных нуклеаз, хотя детали процесса остаются неясными.

Эксперименты *in vivo* демонстрируют, что выбор новых спейсеров и деградация ДНК происходят по обе стороны от таргетируемого протоспейсера [12]. Это значит, что в какой-то момент Cas3 начинает движение в направлении 3'→5' по T-цепи, один или в составе PAC. Механизм переключения Cas3 с NT- на T-цепь остаётся неизвестным.

В данной работе мы применили высокопроизводительное секвенирование для анализа влияния аминокислотных замен в хеликазном домене Cas3 на эффективность праймированной адаптации и распределение вокруг таргетируемого протоспейсера последовательностей, которые служат источниками новых спейсеров. Замена D452A в каталитическом мотиве Walker B, осуществляющем расщепление АТФ, снижает эффективность адаптации в 1000 раз, что сравнимо с уровнем наивной адаптации в клетках, в которых отсутствует Cas3. Замена K320N в мотиве Walker A, ответственном за связывание АТФ, приводит лишь к трёхкратному снижению эффективности адаптации. При этом полностью инактивируется приобретение спейсеров со стороны таргетируемого протоспейсера, соответствующей движению Cas3 по T-цепи. Таким образом, наши результаты свидетельствуют о различном влиянии мотивов Walker A и Walker B Cas3 на праймированную адаптацию и демонстрируют ключевую роль аминокислоты K320 в переключении Cas3 с NT- на T-цепь.

Работа поддержана Санкт-Петербургским Государственным Университетом [60236868 (ID 60256969)] и Российским Научным Фондом [19-14-00323].

1. CRISPR provides acquired resistance against viruses in prokaryotes / Barrangou R. et al. // Science. 2018. V. 315. P. 1709–1712.
2. Small CRISPR RNAs guide antiviral defense in prokaryotes / Brouns S.J. et al. // Science. 2008. V. 321. P. 960–964.
3. Structural basis for CRISPR RNA-guided DNA recognition by Cascade / Jore M.M. et al. // Nature Structural and Molecular Biology. 2011. V. 18. P. 529–536.
4. CRISPR immunity relies on the consecutive binding and degradation of negatively supercoiled invader DNA by Cascade and Cas3 / Westra E.R. et al. // Molecular Cell. 2012. V.46. N.5 P. 595–605.
5. Mulepati S., Bailey S. In vitro reconstitution of an *Escherichia coli* RNA-guided immune system reveals unidirectional, ATP-dependent degradation of DNA target // Journal of Biological Chemistry. 2013. V. 288. N. 31. P. 22184–22192.
6. In vitro reconstitution of Cascade-mediated CRISPR immunity in *Streptococcus thermophilus* / Sinkunas T. et al. // The EMBO Journal. 2013. V. 32. N. 3. P. 385–394.
7. Molecular memory of prior infections activates the CRISPR/Cas adaptive bacterial immunity system / Datsenko K.A. et al. // Nature Communications. 2012. V. 3. P. 945.
8. Yosef I., Goren M.G., Qimron U. Proteins and DNA elements essential for the CRISPR adaptation process in *Escherichia coli* // Nucleic Acids Research. 2012. V. 40. N.12. P. 5569–5576.
9. Integrase-mediated spacer acquisition during CRISPR-Cas adaptive immunity / Nuñez J.K. et al. // Nature. 2015. V. 519. P. 193–198.
10. CRISPR adaptation biases explain preference for acquisition of foreign DNA / Levy A. et al. // Nature. 2015. V. 520. P. 505–510.
11. Assembly and Translocation of a CRISPR-Cas Primed Acquisition Complex / Dillard K.E. et al. // Cell. 2018. V. 175. N.4. P. 934–946.
12. Detection of spacer precursors formed in vivo during primed CRISPR adaptation / Shiriaeva A.A. et al. // Nature Communications. 2019. V. 10. P. 4603.

Везикулы растительного происхождения – перспективные участники систем доставки терапевтических биомолекул

Л.А. Гараева^{1,3,4}, Е. Д. Путевич^{1,4}, Е.В. Ястремский³, Р.А. Камышинский^{3,5,6}, А.С. Спицына¹, С.Б. Ланда¹, А. Л. Коневега^{1,3,4}, Т. А.Штам^{1,2,3}

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

²Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

⁵Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, Москва, Россия

⁶Московский физико-технический университет, Долгопрудный, Россия

Онкологические заболевания – одна из глобальных проблем человечества. По всему миру, в том числе и в России, число случаев, при которых диагностируются опухолевые новообразования, увеличивается с каждым годом. Существующие методы борьбы с опухолевыми заболеваниями в силу соответствующих ограничений, связанных преимущественно с негативным воздействием на здоровые ткани, рецидивами (лучевая терапия, химиотерапия) и хирургическими ограничениями при удалении метастаз, не приносят должного эффекта [1].

Очевидно, что необходимы поиски по совершенствованию существующих терапевтических подходов и разработки новых, в том числе систем доставки терапевтических противоопухолевых биомолекул.

Поиски по разработке систем доставки экзогенных биомолекул на основе экстраклеточных везикул (ЭВ) для терапии ряда заболеваний, в частности онкологических, широко описаны в научной литературе на сегодняшний день. Тем не менее лишь недавно внимание научного сообщества обратилось на везикулы растительного происхождения (PEVs) и их теоретический потенциал как доставщиков экзогенных функциональных биомолекул [2]. Практическому подтверждению данной гипотезы посвящены единичные исследования [3], а использование интактных везикул для доставки биомолекул не освещено в научной литературе.

Становится понятным, что на сегодняшний день актуальны исследования, направленные на оценку эффективности загрузки и доставки экзогенных молекул различного типа к клеткам человека при помощи растительных везикул, более того необходим подбор наиболее перспективного источника везикул, что даст толчок в создании систем доставки терапевтических биомолекул.

Таким образом, цель данного исследования – подбор наиболее перспективного источника PEVs для их потенциального использования в фармакологических наносистемах.

В ходе работы впервые были получены PEVs из ряда ранее не описанных в литературе источников неживотного происхождения методом последовательного ультрацентрифугирования. Полученные везикулы были охарактеризованы рядом биофизических методов, что позволило по физическим параметрам сделать выбор наиболее перспективного доставщика PEVs. Так, полученные препараты PEVs были охарактеризованы по концентрации, размеру и морфологии при помощи анализа траектории наночастиц, динамического светорассеяния, атомно-силовой микроскопии и криоэлектронной микроскопии. Впервые были получены при помощи криоэлектронной микроскопии высококачественные микрофотографии интактных везикул растительного происхождения. Также была произведена сравнительная оценка эффективности загрузки ряда экстраклеточных везикул экзогенными биомолекулами при помощи проточной цитометрии.

В рамках работы впервые были получены PEVs из 10-источников, ранее не описанных в литературе, в том числе из зеленых одноклеточных водорослей и грибов. Из изученных организмов были выделены три представителя, внеклеточные везикулы которых наилучшим образом удовлетворяют параметрам (наибольший выход частиц на 100 мл сока/культуральной среды, размер частиц, эффективность загрузки) идеального контейнера для адресной доставки лекарств.

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

1. A. C. Begg, F. A. Stewart, C. Vens, “Strategies to improve radiotherapy with targeted drugs,” Nat. Rev. Cancer, vol. 11, no. 4, pp. 239-253, Apr. 2011.

2. Yong Cui, Jiayang Gao, Yilin He, Liwen Jiang. Plant extracellular vesicles. Protoplasma. 2020 J; 257(1):3-12.

3. M. Zhang, E. Viennois, M. Prasad, et al., Edible ginger-derived nanoparticles: A novel therapeutic approach for the prevention and treatment of inflammatory bowel disease and colitis-associated cancer, Biomaterials, 2016, 101, 321–340.

Влияние оптогенетической активации астроцитов на активность нейронов гиппокампа

Е.И. Герасимов¹, А.И. Ерофеев¹, А.А. Бородинова², П.М. Балабан², И.Б. Безпрозванный^{1,3}, О.Л. Власова¹

¹*Лаборатория молекулярной нейродегенерации Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ), г. Санкт-Петербург, Россия*

²*Лаборатория клеточной нейробиологии обучения, Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии Российской академии наук, Москва 117485, Россия*

³*Отделение физиологии Юго-Западного медицинского центра Университета Техаса, Даллас, Техас, США*

За последние 10 лет метод оптогенетики нашел широкое применение в различных областях нейробиологии. С его помощью можно не только контролировать, но и регулировать клеточную активность с высоким пространственным и временным разрешением. В данном исследовании оптогенетическая активация была применена к астроцитам, экспрессирующим метаболитные (Orto-a1AR) опсины. В ходе работы были определены параметры астроцитарной оптогенетической стимуляции, при которых существенно изменялась ответная частота спонтанных токов пирамидных нейронов гиппокампа. Оптимальные параметры оптогенетического воздействия были применены в экспериментах по регистрации изменения полевого потенциала, в которых при использовании метаболитных опсинов наблюдалась потенциация значений нормализованного угла наклона.

Астроциты играют важную роль в поддержании и регуляции нейронных сетей в головном мозге. Они способны влиять на активность нейронов, регулируя внеклеточную концентрацию ионов калия, а также нейротрансмиттеров, благодаря экспрессии на их мембране большого количества переносчиков электрогенных медиаторов (глутамат, гамма-аминомасляная кислота, глицин) [1]. Высвобождая глиотрансмиттеры, астроциты воздействуют на нейрональные рецепторы, модулируя возбудимость нейронов, синаптическую передачу и пластичность. Астроциты не генерируют потенциал действия в ответ на стимул, но реагируют внутриклеточными кальциевыми волнами [Ca²⁺] [2]. При распространении этой волны высвобождаются серин, цитокины и лактат, которые модулируют активность нейронов [3]. Способность астроцитов высвобождать глутамат позволяет регулировать функцию NMDA-рецепторов, тем самым контролируя возбуждение в сети нейронов. Астроциты тесно связаны с патогенезом и патологическими процессами нейродегенеративных заболеваний [4], поэтому способность контролировать их активность становится актуальной и необходимой задачей при лечении нейродегенеративных заболеваний. В качестве основного метода активации астроцитов в данной работе используется метод оптогенетики, позволяющий избирательно, с физиологическим пространственно-временным разрешением, регулировать активность астроцитов гиппокампа.

Цель исследования заключалась в оценке влияния оптогенетической активации астроцитов, экспрессирующих метаболитный опсин (Orto-a1AR), на электрофизиологическую активность нейронов гиппокампа мышей.

В работе использовали мышей линии C57BL/6J. Анализ электрофизиологической активности нейронов проводился путем измерения количества спонтанных токов до и после оптогенетической активации астроцитов методом локальной фиксации потенциала (patch-clamp) в режиме фиксации потенциала конфигурации «целая-клетка». Оптимальный режим активации применялся при регистрации полевых возбуждающих постсинаптических потенциалов (пВПСП) в переживающих срезах. Электрофизиологические эксперименты были проведены через три недели после введения конструкции вируса AAV5 GfaABC1D_orto-a1AR_EYFP в гиппокамп мыши. Регистрацию нейрональной активности проводили в области CA1 гиппокампа с использованием стеклянных микроэлектродов (2-3 МОм), заполненных К-глюконатным внутрипипеточным раствором, для регистрации пВПСП использовался стимулирующий биполярный витой электрод и стеклянный микроэлектрод (200-400 КОм).

Результаты исследований показали повышение активности пирамидных нейронов гиппокампа в ответ на оптическую стимуляцию астроглиальных клеток, содержащих вирус Orto-a1AR-EYFP, и позволили определить режим световой стимуляции астроглии. В импульсном режиме $t=100$ мс, $T=1$ с наблюдалось значительное изменение частоты возбуждающих постсинаптических токов (ВПСТ) относительно значения базового уровня ($1,71 \pm 0,36$ раз). Исходя из полученных результатов, мы предполагаем, что оптогенетическая активация астроцитов, экспрессирующих Orto-a1AR конструктор на мембране, может привести к высвобождению глутамата в синапсах пирамидных нейронов, как это было ранее показано на нейронах зрительной коры [5]. Вероятно, эта стимуляция может обеспечить выделение глиотрансмиттеров из астроглии, которые и влияют на активность синапсов пирамидных нейронов. Отсутствие изменения амплитуды после оптогенетической активации может быть объяснено незатронутым квантовым высвобождением возбуждающих нейромедиаторов.

Для того, чтобы понять, возможно ли вызвать потенцирование на уровне популяции клеток, после оптогенетической активации астроцитов, экспрессирующих Orto-a1AR-EYFP, была проведена регистрация пВПСП в CA1-части гиппокампа. В этом исследовании на коллатерали Шаффера воздействовали витым стимулирующим электродом до и после оптогенетической активации астроцитов с выбранным импульсным режимом. Исходя из полученных результатов, оптогенетическая стимуляция ($t=100$ мс, $T=1$ с) метаболитного опсина Orto-a1AR-EYFP приводит к потенциации пВПСП в переживающих срезах гиппокампа головного мозга. Данный эффект может быть объяснен тем, что при световой активации астроцитов метаболитным конструктором, они выделяют глутамат и D-серин, который необходим для формирования долговременных изменений пластичности [6]. Активация Orto-a1AR также приводит к повышению уровня Ca²⁺ в астроцитах в ответ на оптическую стимуляцию, что опосредуется специфическими внутриклеточными каскадами вторичного мессенджера.

Таким образом, для целей активации нейрональной активности возможно использовать метаболитные опсины, в частности Orto-a1AR, экспрессированные в астроцитах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда 20-65-46004 (ОЛВ).

1. Halassa M.M. Integrated brain circuits: Astrocytic networks modulate neuronal activity and behavior / M.M. Halassa, P.G. Haydon // Annual Review of Physiology. – 2009. – Vol. 72. – P. 335-355.
2. Large-scale calcium waves traveling through astrocytic networks in vivo / N. Kuga [et al.] // Journal of Neuroscience. – 2011. – Vol. 31. – № 7. – P. 2607-2614.
3. Optogenetic and chemogenetic modulation of astroglial secretory phenotype. / A.B. Salmina [et al.] // Reviews in the neurosciences. – 2021.
4. Toniolo S. Modulation of brain hyperexcitability: Potential new therapeutic approaches in alzheimer's disease / S. Toniolo, A. Sen, M. Husain // International Journal of Molecular Sciences. – 2020. – Vol. 21. – № 23. – P. 1-37.
5. Optogenetic astrocyte activation modulates response selectivity of visual cortex neurons in vivo / G. Perea [et al.] // Nature Communications. – 2014. – Vol. 5.
6. Long-term potentiation depends on release of d-serine from astrocytes / C. Henneberger [et al.] // Nature. – 2010. – Vol. 463. – № 7278. – P. 232-236.

Разработка технологии уплотнения органической почвы микроорганизмами

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

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

²Курчатовский геномный центр — ПИЯФ, Гатчина, Россия

Методы биоцементации почвы представляют собой биохимические процессы, происходящие внутри почвенной матрицы за счет осаждения карбоната кальция, что улучшает ее геотехнические характеристики. CaCO₃ вызывает снижение проницаемости почвенного покрова, одновременно увеличивая его жесткость и прочность [1]. Наиболее известными методами биоцементации являются ферментативно-индуцированное и микробиологическое осаждение CaCO₃, где процессы вызываются уреоллизом. В настоящее время наибольшее внимание уделяется микробиологическому осаждению, при котором происходит гидролиз мочевины в результате метаболических реакций микроорганизмов. В процессе уреоллиза карбонат кальция осаждается в пустотах почвы, тем самым увеличивая ее прочность [2]. Данный метод является перспективной альтернативой традиционным методам укрепления почв посредством неорганических добавок, обладая минимальным воздействием на окружающую среду.

Целью данной работы была разработка технологии уплотнения органического грунта при обработке его суспензиями микроорганизмов. В процессе работы был проведен скрининг микроорганизмов на их способность осажать кристаллы карбоната кальция, а также были определены параметры pH, накопления биомассы и изменения активности уреазы в процессе роста выбранных бактерий [3]. С использованием модельного микроорганизма *B. licheniformis* DSMZ 8287 были подобраны условия для уплотнения органического грунта. В процессе работы была подобрана оптимальная среда для уплотнения почвы, содержащая 1М мочевины и 0,5М хлорида кальция. В качестве метода внесения рабочего раствора был выбран метод пролива, а также метод биоувеличения почвенной микрофлоры. Отобранные штаммы бактерий были проверены на их способность увеличивать прочностные характеристики органического грунта. Образцы, обработанные *M. Luteus* 6, смесью бактерий (Mix) и *B. Licheniformis* DSMZ 8782, по показателям прочности превосходят необработанный грунт в полтора — два раза.

На данный момент ведется разработка системы уплотнения разного типа органического грунта в соответствии с подобранными условиями.

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

1. DeJong J., Mortensen B. M., Martinez B. and Nelson D. Bio-mediated soil improvement. *Ecol. Eng.*, 2010. 36:197–210.
2. Khodadadi H., Kavazanjian E. and Bilsel H. Mineralogy of calcium carbonate in MICP-treated soil using soaking and injection treatment methods. *Geotechnical Frontiers*, 2017 Conf. 195–201.
3. Golovkina D.A., Zhurishkina E.V., Ivanova L.A., Kulminskaya A.A., et al. Calcifying Bacteria Flexibility in Induction of CaCO₃ Mineralization. *Life*. 2020. 317.

Подбор оптимальных условий для полимеризации белка FtsZ *Acholeplasma laidlawii*

Д. М. Голофеева¹, Н. А. Румянцева¹, И. Е. Вишняков², А. Д. Ведяйкин¹

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

²Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург

Цитокинез как часть жизненного цикла бактериальной клетки представляет большой интерес для исследователей, т. к. новые открытия в этой области помогают развитию различных способов борьбы с бактериальными инфекциями. Большинство изученных типов бактерий делятся по общему принципу: процессом деления управляет молекулярная машина – дивисома. Её основной структурный элемент - гомолог тубулина белок FtsZ, он формирует Z-кольцо в сайте деления и привлекает несколько других белков деления, запуская цитокинез [1]. FtsZ не только привлекает, но и управляет работой белков деления, в том числе ферментов, вовлеченных в перестройку клеточной стенки.

Таким образом, FtsZ - молекула, играющая ключевую роль в процессе деления большинства бактерий. Однако не для всех видов бактерий ясна роль белка FtsZ. Mollicutes (микоплазмы) – самые маленькие бактерии, способные к росту на искусственных питательных средах, у них отсутствует клеточная стенка, а также сильно ограничен метаболизм, что не мешает многим видам микоплазм быть опасными патогенами и успешно паразитировать в клетках эукариот [2]. В геноме данных бактерий нет большинства генов деления, однако большинство микоплазм имеют ген белка FtsZ. Механизмы деления микоплазменных клеток всё ещё остаются мало изученными, так же как неизвестна роль белка FtsZ в их жизненном цикле.

Для классов хорошо изученных бактерий, например, *E. coli*, главной особенностью белка FtsZ, обеспечивающей его функции, служит его способность образовывать полимеры, формируя Z-кольцо, которое служит каркасом для дивисомы. Структуры же, которые FtsZ формирует в клетках микоплазм, а также его функции до сих пор полностью не выяснены. В данной работе был изучен белок FtsZ бактерии *Acholeplasma laidlawii*, относящейся к классу Mollicutes, а именно его способность к полимеризации. При помощи метода статического рассеяния света было показано, что в условиях *in vitro* в присутствии гуанозинтрифосфата (ГТФ) данный белок способен полимеризоваться. Варьируя условия, удалось выяснить, каким образом меняется характер полимеризации FtsZ в зависимости от уровня pH и концентрации соли KCl.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-04-00760

1. Rowlett V.W., Margolin W. The bacterial divisome: ready for its close-up // Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci. 2015. V. 370. № 1679. pii: 20150028.

2. Борхсениус С.Н., Чернова О.А., Чернов В.М., Вишняков И.Е. Микоплазмы в биологии и медицине начала XXI века. СПб.: Наука, 2016. 333 с.

Поиск возможных ингибиторов для белков SARS-CoV-2 с помощью виртуального скрининга лигандов

С.В. Горелов^{1,3}, А.В. Швецов^{1,3,4}, В.В. Егоров^{1,2,4}

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

²НИИ гриппа имени А.А. Смородинцева

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

⁴НИЦ «Курчатовский институт», Москва

SARS-CoV-2 — это оболочечный одноцепочный вирус с положительной цепью РНК, относящийся к роду Betacoronavirus, обладающий крупными вирусными РНК-геномами и вызывающий болезнь COVID-19. Был впервые зарегистрирован в 2019 году. Хотя SARS-CoV-2 относится к группе бета-коронавирусов, он отличается от MERS-CoV и SARS-CoV. К настоящему времени он уже затронул более 210 миллионов человек во всем мире. Существующие методы виртуального скрининга и компьютерного моделирования позволяют проводить исследования, которые могут обнаружить новые потенциальные ингибиторы основной протеазы вируса SARS, тем самым определив вещества с возможными терапевтическими свойствами против COVID-19.

Репликативный цикл коронавируса начинается с трансляции ORF1a и ORF1b после проникновения и высвобождения генома. Сначала синтезируются два больших полипротеина репликазы (pp1a и pp1ab). Затем они расщепляются на 16 неструктурных белков (nsps), включая nsp12, вирусную РНК-зависимую РНК-полимеразу (RdRp), папаин-подобную протеазу (nsp3) и 3С-подобную протеазу (nsp5). Вирусные неструктурированные белки задействуют клетку-хозяина мембранной структуры для сборки в репликационные и транскрипционные комплексы, которые участвуют в синтезе минус-цепи РНК. Затем синтезируются субгеномные РНК и экспрессируются структурные и вспомогательные белки. Патогенез тяжёлого острого респираторного синдрома коронавируса SARS-CoV-2 является важным вопросом для лечения и профилактики SARS, а современное состояние изучаемой проблемы позволяет находить новые потенциальные ингибиторы [1,2].

Данная работа посвящена проведению виртуального скрининга лигандов для белков Sars-CoV-2, в частности, для неструктурированных белков nsp5 и nsp12. Для этого применялись методы молекулярного докинга и молекулярной динамики. Молекулярный докинг рассчитывался в программе AutoDock Vina, в то время как для молекулярной динамики и минимизации энергии использовался универсальный программный комплекс GROMACS. В качестве лигандов для молекулярного докинга служили вещества из базы данных ZINC15 в количестве 5901 единица. Полученные в результате структурированные списки лигандов из базы данных можно использовать для отбора потенциальных ингибиторов с последующим расчётом констант связывания в растворах с рекомбинантными белками. Проведение процедуры молекулярной динамики позволило оценить взаимодействие белка nsp7, прошедшего предварительную минимизацию энергии, с несколькими фрагментами последовательности кошачьего, собачьего и свиного коронавирусов N1YRSLAETR и выделить потенциальные сайты связывания с лигандом. Молекулярная динамика также позволила пронаблюдать образование амилоидоподобных фибрилл с участием N1YRSLAETR.

1. Wang, W., Zhou, Z., Xiao, X, et al. Cell Mol Immunol. 2021 Apr;18(4):945-953.

2. Mariano G, Farthing RJ, Lale-Farjat SLM, Bergeron JRC. Front Mol Biosci. 2020 Dec;17(7):605236.

Роль участков N-домена дрожжевого белка Sup35 в образовании биоконденсатов Sup35 при осмотическом шоке у *S. Cerevisiae*

Н.А. Горшенева¹, А.В. Гризель¹, А.А. Рубель,^{1,2} Ю.О. Чернов^{1,3}

¹ Научная лаборатория биологии амилоидов, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

² Кафедра генетики и биотехнологии, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

³ Технологический институт Джорджии, Атланта, США

Биомолекулярные конденсаты (биоконденсаты) – немембранные органеллы клетки, содержащие белки и нуклеиновые кислоты; их структура — «жидкие капли» или гелеобразные твердые агрегаты [1]. Формирование биоконденсатов лежит в основе кластеризации рецепторов и передачи сигнала, биогенеза рибосом и адаптации к стрессу. Нарушение их образования связывают с нейродегенеративными заболеваниями и старением.

Часто в формировании биоконденсатов принимают участие белки, содержащие неструктурированные участки. Примером такого белка может служить дрожжевой белок Sup35, эукариотический фактор терминации трансляции eRF3. Белок Sup35 является структурным белком приона [*PSI*⁺] и состоит из 3 доменов: (1) прионного N-домена, (2) M-домена и (3) C-домена, обладающего ГТФ-азной активностью. Прионный N-домен белка Sup35 участвует в образовании биоконденсатов при снижении цитоплазматического pH; предположительно, сенсором стресса выступает M-домен [2]. Механизм конденсации Sup35 пока не ясен. Так же не известно, какие именно участки N-домена вовлечены в образование биоконденсатов.

Задача данного исследования – выявить участки N-домена Sup35, ответственные за образование биоконденсатов Sup35 в *Saccharomyces cerevisiae*. Для этого исследовали возможность образования биоконденсатов *in vivo* вариантами Sup35 с различными делециями в N-домене, слитыми с флуоресцентным белком YFP, с использованием флуоресцентной микроскопии. Так как делеции участков белка могут повлиять на уровень его продукции в клетках дрожжей, мы также исследовали количество изучаемых белков с помощью метода вестерн-блоттинга белковых лизатов.

Нами было показано, что N-домен Sup35 способствует формированию биоконденсатов Sup35 при осмотическом шоке (1M KCl). При этом NQ-богатый участок (2-39 а.к.), а также участок OPR (40-97 а.к.) играют структурную роль в образовании биоконденсатов.

Работа поддержана грантами РФФ №20-14-00148, а также выполняется при поддержке ресурсных центров «ХРОМАС», «Биобанк» и «РМиКТ» научного парка СПбГУ.

1. Banani S., Lee H., Hyman A., Rosen M. Biomolecular condensates: organizers of cellular biochemistry // Nature Reviews Molecular Cell Biology. 2017. V. 18, p. 285–298.
2. Franzmann T.M., Jahnel M., Pozniakovsky A., Mahamid J., Holehouse A.S., Richter D., Baumeister W., Grill S.W., Pappu R.V., Hyman A.A., Alberti S. Phase separation of a yeast prion protein promotes cellular fitness // Science. 2018. V. 359, №6371. p. eaao5654.

Определение термодинамических и кинетических параметров взаимодействия валиновой дипептидил-тРНК с А сайтом рибосомного комплекса

А.А. Грачев^{1,2}, Д.Д. Чайка^{1,2}, О.А. Толичева¹, А.Л. Коневега^{1,2,3}

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

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

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Биосинтез белка – тонко регулируемый процесс, вовлекающий в себя большое количество различных по химической структуре и природе компонентов. Нарушение любого из этапов этого процесса может оказаться фатальным для клетки, и поэтому система трансляции у бактерий является привлекательной мишенью для действия антибактериальных средств [1]. Изучение детального механизма действия нового антибиотика требует сборки реконструированной *in vitro* функционально активной машинерии бактериальной трансляции из высокоочищенных компонентов. Тем не менее, из-за возможной зависимости действия антибиотика от типа функциональных субстратов, входящих в рибосомный комплекс на конкретном этапе трансляции [2], требуется использование как можно более разнообразного набора естественных субстратов рибосомы, в частности, аминоацил-тРНК и мРНК. Целью данной работы было изучение ряда термодинамических и кинетических параметров взаимодействия валиновой дипептидил-тРНК (fMet-Val-тРНК^{Val}) с А сайтом элонгирующего рибосомного комплекса из *E.coli*. Были определены значения K_d , k_{off} , k_{on} , ΔG^0 для диапазона температур, а также определены величины ΔH^0 и ΔS^0 из построения Вант-Гоффа. Полученные в ходе работы данные позволяют использовать эту систему для анализа влияния на А-сайтовое взаимодействие исследуемых антибиотиков.

1. Arenz S., Wilson D. N. Bacterial protein synthesis as a target for antibiotic inhibition //cold spring harbor perspectives in medicine. – 2016. – Т. 6. – №. 9. – С. a025361.
2. Vázquez-Laslop N., Mankin A. S. Context-specific action of ribosomal antibiotics //Annual review of microbiology. – 2018. – Т. 72. – С. 185-207.

Взаимосвязь процесса фазового разделения и амилоидной агрегации белка Sup35

А.В. Гризель¹, Н.В. Горшенёва¹, А.В. Майтова^{1,2}, А.А. Рубель^{1,2,3}, Ю.О. Чернов^{1,4}

¹ Научная лаборатория биологии амилоидов, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

² Научно-Технологический Университет Сириус, Сочи

³ Кафедра генетики и биотехнологии, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

⁴ Технологический институт Джорджии, Атланта, США

Внутриклеточное пространство содержит большое количество макромолекул и для эффективного проведения биохимических реакций требуется чёткая организация его компонентов. Для этой цели служат различные мембранные органеллы, а также белковые комплексы и особые скопления белков и РНК – биомолекулярные конденсаты. Образование таких конденсатов посредством фазового разделения способствует выполнению белками их функций (белки спеклов, ядрышка, центриоли и др.), либо защите клетки от стрессовых воздействий (белки стресс-гранул) [1]. Зачастую молекулярные конденсаты образованы белками, содержащими неструктурированные домены низкой сложности LCD (low complexity domains), которые обогащены определенными аминокислотами. Нарушения в образовании таких конденсатов могут приводить к развитию нейродегенеративных заболеваний (например, к боковому амиотрофическому склерозу), при этом для некоторых белков (например, TDP-43 и FUS) показан переход конденсатов в упорядоченные необратимые белковые агрегаты (амилоиды) [2]. Однако взаимосвязь молекулярных конденсатов и амилоидных агрегатов до конца не ясна.

Для изучения взаимосвязи молекулярных конденсатов и амилоидной агрегации мы использовали дрожжевой фактор терминации трансляции Sup35, который содержит большие LCD-домены с N-конца белка (N и M-домены (Sup35NM)). Известно, что Sup35NM ответственны как за амилоидную агрегацию белка Sup35 [3], так и за переход в молекулярные конденсаты при рН-стрессе [4]. Нами было показано, что образование конденсатов Sup35NM осуществляется и при осмотическом шоке, при этом цитоплазматический рН остается нейтральным. Продемонстрировано, что M-домен препятствует фазовому переходу Sup35 в отсутствие стрессовых воздействий. Для выявления механизма образования конденсатов Sup35 и выявления взаимосвязи фазового разделения и амилоидной агрегации был проведен детальный делеционный анализ N-домена. Было показано, что практически весь N-домен (1-97 а.к.) необходим для эффективного образования биоконденсатов и амилоидных фибрилл. Эти данные указывают, что для фазового разделения и амилоидной агрегации Sup35 важно сочетание определенных аминокислот и размер этого участка, а не конкретный аминокислотный мотив. Это также подтверждается нашими данными, что, несмотря на сильную дивергенцию, Sup35NM из дальнеродственных видов дрожжей также эффективно образуют биоконденсаты и амилоидные агрегаты в клетках *Saccharomyces cerevisiae*.

Данная работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-34-51054, и при помощи Ресурсных центров «Биобанк», «Хромас» и «Развитие молекулярных и клеточных технологий» СПбГУ.

1. Banani S.F., Lee H.O., Hyman A.A., Rosen M.K. Biomolecular condensates: organizers of cellular biochemistry // *Nature Reviews Molecular Cell Biology*. 2017. V. 18, p. 285–298.
2. Agrawal S., Kuo P.H., Chu L.Y., Golzarroshan B., Jain M., Yuan H.S. RNA recognition motifs of disease-linked RNA-binding proteins contribute to amyloid formation // *Scientific reports*. 2019. V. 9(1), p. 6171.
3. Lyke D.R., Dorweiler J.E., Manogaran A.L. The three faces of Sup35 // *Yeast*. 2019. V. 36(8), p. 465-472.
4. Franzmann T.M., Jahnel M., Pozniakovsky A., Mahamid J., Holehouse A.S., Nüske E., Richter D., Baumeister W., Grill S.W., Pappu R.V., Hyman A.A., Alberti S. Phase separation of a yeast prion protein promotes cellular fitness // *Science*. 2018. V. 359, №6371. p. eaao5654.

Развитие гиппокамп-ассоциированных нарушений в модели болезни Хантингтона *in vivo*

Е.Д. Гришина¹, Н.А. Красковская¹, А.И. Ерофеев¹, С.А. Пушкарева¹, Е.И. Герасимов¹, О.Л. Власова¹, И.Б. Безпрозванный^{1,2}

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

²*Юго-Западный медицинский центр университет Техаса, Даллас, штат Техас, США*

Болезнь Хантингтона (БХ) — это аутосомно-доминантное нейродегенеративное заболевание, вызванное накоплением мутантного белка хантингтина (мХтТ) в клетках головного мозга [1]. Возникающие при этом когнитивные нарушения начинают проявляться еще до появления первых симптомов моторной дисфункции [2]. Снижение когнитивных функций тесно связано с изменением синаптической пластичности и деградацией синаптических связей нейронов, происходящими в области коры, стриатума и гиппокампа. При этом нарушения в последней из структур являются наименее изученными. Для исследования этиологии гиппокамп-ассоциированных когнитивных нарушений при БХ были проведены поведенческие тесты и ряд экспериментов, направленных на выявление нарушений долговременной потенциации (ДВП) и морфофункциональных изменений СА1 области гиппокампа. В настоящем исследовании комплексная оценка изменений производилась на трансгенной линии мышей YAC128, моделирующей БХ.

Для проведения эксперимента по изучению механизмов синаптической пластичности в срезах гиппокампа мышей дикого типа и мышей линии YAC128 использовался электрофизиологический метод, основанный на явлении ДВП. Сравнение значений ДВП в контроле у мышей дикого типа и мышей линии YAC128 подтверждают наличие когнитивных нарушений у последних в возрасте 4-х и 6-ти месяцев ($p < 0,05$). Кроме того, у мышей с моделью БХ по сравнению с мышами дикого типа в возрасте 4-х месяцев прослеживается тренд к уменьшению значения посттетанического потенцирования (ПТП).

Для исследования плотности и морфологии дендритных шипиков СА1 нейронов была создана линия мышей YAC128-М путем кроссбридинга мышей с моделью БХ и мышей линии М, в нейронах которых избирательно экспрессируется зеленый флуоресцентный белок, обеспечивающий визуализацию структур нейрональных клеток. Эксперимент показал значимые различия плотности дендритных шипиков у диких и трансгенных мышей в возрасте 6 месяцев ($p < 0,001$). Наибольший вклад в эту разницу внесло процентное соотношение числа грибовидных шипиков ($p < 0,005$) у мышей линии YAC128-М. Однако к возрасту 9 месяцев, плотность дендритных шипиков нейронов СА1 области гиппокампа у мышей дикого типа оказалась выше, чем у мышей с моделью БХ ($p < 0,05$). Количество грибовидных шипиков у мышей с БХ оказалось незначительно ниже, чем у мышей дикого типа ($p > 0,05$). Из результатов исследования возрастной динамики можно сделать вывод, что у СА1 нейронов мышей дикого типа с возрастом наблюдается выраженная тенденция к увеличению плотности дендритных шипиков ($p < 0,001$), в то время как у животных с моделью БХ этот показатель практически не изменился ($p > 0,05$). Кроме того, количество грибовидных шипиков СА1 нейронов мышей трансгенной линии в возрасте 9-ти месяцев заметно снижено по сравнению с показателем более молодых животных того же генотипа ($p < 0,001$). Результат морфофункционального эксперимента объясняется тем, что для мышей дикого типа в связи с приобретением новых навыков и развитием когнитивных способностей характерно увеличение плотности дендритных шипиков по мере взросления. У животных новой трансгенной линии такой закономерности не наблюдается. В результате накопления мХтТ в телах нейронов мышей линии YAC128 в возрасте 6-ти месяцев плотность шипиков выше, чем у мышей дикого типа, ключевую роль в этой разнице играет количество грибовидных шипиков.

Для анализа когнитивных нарушений у мышей с моделью БХ использовался наиболее распространенный тест - водный лабиринт Морриса, позволяющий оценить гиппокамп-ассоциированные нарушения в формировании пространственной памяти. К концу обучающих сессий мыши дикого типа продемонстрировали способность к обучению и запоминанию новой информации, увеличив количество успешных попыток к 4-му дню обучения ($p < 0,05$), в то время как у мышей линии YAC128 количество успешных попыток в 1 и 4 день осталось одинаковым. Однако в тестовый день процент времени в квадранте, где ранее находилась платформа, и число пересечений платформы существенно не отличались.

К возрасту 9-ти месяцев способность к обучению у мышей обоих генотипов в целом снизилась: в среднем они проводили одинаковое количество времени в квадранте, где во время тренировочных сессий располагалась платформа. В тестовый день количество пересечений зоны, где ранее находилась платформа также достоверно не отличалось. При оценке количества успешных попыток также не было обнаружено различий как между генотипами, так и мышами одного генотипа в первый и последний день обучающих сессий.

Таким образом, полученные нами и другими группами авторов данные указывают на непосредственную вовлеченность нейродегенеративных изменений в гиппокампе в развитие когнитивных нарушений, наблюдаемых на ранних стадиях развития БХ [3-5]. Полученные нами результаты о нарушениях в гиппокампе указывают на системную синаптическую дисфункцию при данной нейропатологии в разных отделах головного мозга, наблюдаемую даже в отсутствии агрегатов мутантного белка в нейронах.

Работа поддержана грантом РФФ № 19-15-00184.

1. Bates G.P. et al. Huntington disease // Nature Reviews Disease Primers. Nature Publishing Group, 2015. Vol. 1.
2. Van Raamsdonk, J. M., Pearson, J., Slow, E. J., Hossain, S. M., Leavitt, B. R., and Hayden, M. R. (2005) Cognitive dysfunction precedes neuropathology and motor abnormalities in the YAC128 mouse model of Huntington's disease, *J Neurosci*, 25, 4169-4180, doi: 10.1523/JNEUROSCI.0590-05.2005.
3. Murphy, K. P., Carter, R. J., Lione, L. A., Mangiarini, L., Mahal, A., Bates, G. P., Dunnett, S. B., and Morton, A. J. (2000) Abnormal synaptic plasticity and impaired spatial cognition in mice transgenic for exon 1 of the human Huntington's disease mutation, *J Neurosci*, 20, 5115-5123.
4. Richards, P., Didszun, C., Campesan, S., Simpson, A., Horley, B., Young, K. W., Glynn, P., Cain, K., Kyriacou, C. P., Giorgini, F., and Nicotera, P. (2011) Dendritic spine loss and neurodegeneration is rescued by Rab11 in models of Huntington's disease, *Cell Death Differ*, 18, 191-200, doi: 10.1038/cdd.2010.127.
5. Lione, L. A., Carter, R. J., Hunt, M. J., Bates, G. P., Morton, A. J., and Dunnett, S. B. (1999) Selective discrimination learning impairments in mice expressing the human Huntington's disease mutation, *J Neurosci*, 19, 10428-10437.

Криоэлектронная микроскопия экстраклеточных везикул жировой ткани при ожирении

**К.В. Драчева^{1,2}, Л.А. Гараева¹, Р.А. Камышинский³, Е.В. Ястремский³, И.А. Побожьева^{1,2},
К.А. Анисимова², С.Г. Баландов², З.М. Хамид², Д.И. Василевский², Т.А. Штам^{1,3}, С.Н.
Пчелина^{1,2}, В.В. Мирошникова^{1,2}**

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

²Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет имени академика И.П. Павлова Министерства здравоохранения Российской Федерации 197022, г. Санкт-Петербург

³НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Экстраклеточные везикулы (ЭВ, экзосомы) – это сферические частицы с внешним липидным бислоем, секретируемые практически всеми клетками организма [1]. ЭВ осуществляют межклеточную коммуникацию посредством транспорта белков, липидов, мРНК и микроРНК и играют важную роль в различных физиологических и патологических процессах. Последние данные свидетельствуют о том, что ЭВ жировой ткани (ЖТ) участвуют в регуляции энергетического метаболизма, чувствительности к инсулину и воспаления [2]. Поэтому изменение количества и морфологии ЭВ, секретируемых ЖТ, может быть ассоциировано с метаболическими нарушениями и развитием сопутствующих патологий.

Целью данной работы было изучение морфологии ЭВ подкожной и висцеральной жировой ткани (ПЖТ, ВЖТ) при ожирении и сахарном диабете 2 типа (СД2).

Образцы ПЖТ и ВЖТ были получены от лиц с ожирением при бариатрических операциях, из них с СД2 – 7 человек (средний возраст 47±9 лет, индекс массы тела (ИМТ) 47,5±7,2, вес пациентов от 108 до 173 кг), без СД2 – 6 человек (средний возраст 39±11 лет, ИМТ 40,9±5,5, вес пациентов от 100 до 145 кг). ЭВ были получены при культивировании эксплантов ПЖТ и ВЖТ *ex vivo* в течение 12 часов и ультрацентрифугировании 100 мл пулированной культуральной среды с использованием центрифуги Optima L-90K (Beckman coulter, США). Концентрация частиц была определена методом анализа траектории наночастиц на анализаторе NTA NanoSight® LM10 (Malvern Instruments, Великобритания). ЭВ были визуализированы с помощью криоэлектронного микроскопа Titan Krios 60-300 TEM/STEM (FEI, США). Подсчет частиц был произведен в программе ImageJ 1.53k. Статистическая обработка результатов выполнена с помощью программы SPSS 17.0.

Всего было проанализировано для ПЖТ: 302 ЭВ размером от 16 нм до 482 нм у пациентов с СД2 и 421 ЭВ размером от 19 до 431 нм у пациентов без СД2; для ВЖТ: 532 ЭВ размером от 25 до 446 нм у пациентов с СД2 и 494 ЭВ размером от 25 до 449 нм у пациентов без СД2. Среди ЭВ преобладали одиночные везикулы сферической формы (до 85,8% для ПЖТ, до 66,4% для ВЖТ), однако наблюдали ЭВ с двойной мембраной, «двойные» ЭВ (одна в другой), а также многослойные частицы. Доля двойных и многослойных частиц была выше среди ЭВ ВЖТ по сравнению с ПЖТ ($p=0,000$).

По размеру одиночные и двойные ЭВ ВЖТ были больше, чем ЭВ ПЖТ как у пациентов с СД2, так и у пациентов с без СД2 ($p<0,01$). Для пациентов с ожирением и СД2 средние размеры одиночных ЭВ ПЖТ составили 63±38 нм, двойных – 116±94 нм, с двойной мембраной – 68±20 нм, многослойных – 166±91 нм; средние размеры одиночных ЭВ ВЖТ составили 99±38 нм, двойных – 133±47 нм, с двойной мембраной – 96±50 нм, многослойных – 198±68 нм. Для пациентов с ожирением без СД2 средние размеры одиночных ЭВ ПЖТ составили 74±41 нм, двойных – 113±41 нм, с двойной мембраной – 71±23 нм, многослойных – 196±97 нм; средние размеры одиночных ЭВ ВЖТ составили 101±52 нм, двойных – 159±61 нм, с двойной мембраной – 93±26 нм, многослойных – 218±68 нм.

Для ЭВ, секретируемых ВЖТ, характерны увеличенный размер частиц и более высокая представленность сложных форм – двойных и многослойных частиц – в сравнении с везикулами, секретируемыми ПЖТ.

Культивирование жировой ткани и подготовка образцов ЭВ выполнено в рамках проекта РФФИ (а 20-015-00502). Эксперименты по криоэлектронной микроскопии ЭВ поддержаны грантом РНФ (19-74-20146).

1. Gao X., Salomon C., Freeman D. J. Extracellular vesicles from adipose tissue—a potential role in obesity and type 2 diabetes? //Frontiers in endocrinology. – 2017. – Т. 8. – С. 202
2. Huang Z., Xu A. Adipose Extracellular Vesicles in Intercellular and Inter-Organ Crosstalk in Metabolic Health and Diseases //Frontiers in Immunology. – 2021. – Т. 12. – С. 463

Разработка схемы выделения и исследование свойств α -L-фукозидазы из гепатопанкреаса краба камчатского *Paralithodes camtschaticus*

Ешимов А.^{1,2}, Швецова С. В.^{1,2}, Энейская Е. В.¹, Кульминская А. А.¹

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

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

α -L-фукозилированные молекулы вовлечены во многие жизненно важные процессы, протекающие в эукариотических клетках, такие как клеточная дифференцировка, эмбриогенез, ангиогенез, апоптоз, развитие воспаления [1]. α -L-фукозидазы представляют собой гликозидгидролазы, которые способны катализировать реакцию гидролиза α -L-фукозидной связи с образованием L-фукозы, не нарушая общую структуру целой фукозилированной молекулы [2]. В связи с этим они являются важными инструментами для определения структуры и биологических функций различных фукоолигосахаридов [3]. α -L-фукозидазы, способные катализировать реакцию трансфукозилирования имеют большой потенциал в синтезе фукозилированных молекул, таких как олигосахариды человеческого молока [4].

В настоящей работе с использованием модельных хромофорных субстратов *n*-нитрофенил гликозидов определен спектр ферментативных активностей из гепатопанкреаса краба камчатского *Paralithodes camtschaticus*, являющегося промышленно добываемым организмом и перспективным источником ценных ферментов [5]. Наиболее высокий уровень активности показали ферменты β -D-галактозидаза, α - и β -D-глюкозидаза и α -L-фукозидаза. Разработана первичная схема выделения и получен частично-очищенный ферментный препарат α -L-фукозидазы из *P. camtschaticus*. Масса нативного ферментного препарата α -L-фукозидазы составила 95 ± 5 кДа. Определены оптимальные значения pH реакции гидролиза модельного субстрата *n*-нитрофенил- α -L-фукопиранозид (pNPFuc): фермент проявляет наибольшую активность при pH 3,5–4,5 и стабилен в диапазоне pH 4,0–7,5. Показано, что α -L-фукозидаза из *P. camtschaticus* способна катализировать реакцию трансгликозилирования с использованием pNPFuc в качестве донора и акцептора. Ведутся работы по определению чувствительности α -L-фукозидазы к воздействию ионов двухвалентных металлов и измерению кинетических параметров реакции гидролиза pNPFuc.

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

1. Becker DJ, Lowe JB. Fucose: biosynthesis and biological function in mammals. *Glycobiology*. 2003 Jul;13(7):41R-53R.
2. Lombard V, Golaconda Ramulu H, Drula E, Coutinho PM, Henrissat B. The carbohydrate-active enzymes database (CAZy) in 2013. *Nucleic Acids Res*. 2014;42(Database issue):D490-D495.
3. Sakurama H, Tsutsumi E, Ashida H, Katayama T, Yamamoto K, Kumagai H. Differences in the substrate specificities and active-site structures of two α -L-fucosidases (glycoside hydrolase family 29) from *Bacteroides thetaiotaomicron*. *Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry*. 2012;76(5):1022-1024.
4. Wan L, Zhu Y, Zhang W, Mu W. α -L-Fucosidases and their applications for the production of fucosylated human milk oligosaccharides. *Appl Microbiol Biotechnol*. 2020;104(13):5619-5631
5. Ponomareva T, Timchenko M, Filippov M, Lapaev S, Sogorin E. Prospects of Red King Crab Hepatopancreas Processing: Fundamental and Applied Biochemistry. *Recycling*. 2021; 6(1):3.

Исследование влияния N-(2-хлорфенил)-2-(4-фенилпиперазин-1-ил) ацетамида на полимеризацию актина

Н. И. Зернов¹, В. С. Камарян², А. Т. Макичян², Л. С. Унанян²,
Е. А. Попугаева¹

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

²Российско-Армянский университет, Ереван, Армения

Болезнь Альцгеймера является самой распространенной формой деменции в мире. Заболевание на сегодняшний день считается неизлечимым. Болезнь Альцгеймера характеризуется синаптической дисфункцией, выражающейся через потерю дендритных шипиков и изменениями их морфологии [1]. Ранее было найдено соединение 51164 (N-(2-хлорфенил)-2-(4-фенилпиперазин-1-ил) ацетамид), которое способно восстанавливать структуру дендритных шипиков в гиппокампальных нейронах в условиях амилоидной токсичности [2]. Считается, что клеточный каркас шипиков формируется полимеризацией актина (последовательным соединением G-актина в единую цепь, называемую фибриллярным актином (F-актин)) [3].

Целью нашей работы является исследование прямого взаимодействия 51164 с молекулой G-актина *in silico* и *in vitro*.

in silico исследования проводились с использованием методов молекулярного моделирования. Для предварительного анализа возможного взаимодействия 51164 с молекулой G-актина был проведен молекулярный докинг с использованием программы Autodock Vina [4]. Достоверность результатов докинга обеспечивалась 10-кратной повторяемостью 20-и начальных конформаций. Молекулярная динамика процесса комплексообразования осуществлялась на основе Gromacs [5]. Конформационный анализ и визуализация комплекса лиганд-мишень проводился с использованием программы Discovery studio visualizer [6]. Кластеризация данных осуществлялась с помощью алгоритма FOREL в среде Python [7]. Трехмерная молекулярная модель G-актина была взята из базы данных RCSB с идентификационным номером PDB ID: 3HBT

Полученные нами результаты молекулярного моделирования свидетельствуют, что 51164 взаимодействует с G-актин в активном центре белка мишени. Комплексообразование осуществляется за счет электростатических и гидрофобных сил В процесс комплексообразования вовлечены ключевые аминокислотные остатки Asp11, Asp154. Наблюдается также единичная водородная связь с Lys336 с дистанцией 2.6 Å. Рассчитанная константа связывания для комплекса лиганд-мишень равна 8.31×10^6 при среднеквадратическом отклонении RMSD=0.6 Å.

in vitro исследование полимеризации актина в фибробластах мышей линии FVB проводилось с помощью определения фрактальной размерности. Клетки выделялись из хвоста 1 — 3-дневных мышат. Культивирование клеток происходило в стандартных условиях (необходимая влажность, 5% CO₂, 37° C) в питательной среде DMEM (Gibco, #41965) с добавлением 10% FBS (Gibco, #10500), 1% PEST, (Gibco, #15140), 1% Sodium Pyruvate (Gibco, #11360), 1% MEM NEAA (Minimum Essential Medium Non-Essential Amino Acids, Gibco, #11140). Сразу после воздействия соединением 51164 (1 мкМ) и/или цитохалазином D (2.5 мкг/мл) клетки 1 раз отмывались в растворе Na-фосфатного буфера, 10 минут фиксировались 4% раствором параформальдегида при комнатной температуре, 5 минут пермеабелизовались 0.1% раствором Тритона X-100 и окрашивались 10 минут родамин-фаллоидином (3-5 мкг/мл, Invitrogen, #R415) при комнатной температуре. Конфокальная микроскопия препаратов производилась при помощи конфокального микроскопа (Thorlabs) при 40-кратном увеличении (LUMPlanFL N, 40x/0.80 W, OLYMPUS) с разрешением 0.3 мкм/пиксель при помощи программного обеспечения ThorlmGLS1.5. Размер изображений 1024x1024 пикселя. Расчёт фрактальной размерности проводили в ImageJ с использованием плагина FracLac.

Было обнаружено, что фрактальная размерность актина фибробластов в контрольной группе составляла 1.70 ± 0.03 . При воздействии на клетки соединением 51164 в течение 15 минут фрактальная размерность статистически не изменялась и составляла 1.68 ± 0.02 . Инкубация клеток с цитохалазином D в течение того же времени привела к снижению фрактальной размерности до значения 1.56 ± 0.02 , а при воздействии цитохалазина D вместе с соединением 51164 в течение 15 минут фрактальная размерность возросла до 1.62 ± 0.03 . Стоит отметить, что в этой группе видны фрагменты фибриллярного актина.

Уменьшение фрактальной размерности актина ассоциировано с разборкой актинового скелета [8], таким образом увеличение фрактальной размерности актина в группе «цитохалазин D + 51164» ещё раз доказывает, что соединение 51164 стимулирует полимеризацию актина.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания по теме «Реализации комплекса мер по повышению эффективности деятельности Российской-Армянского (Славянского) и Белорусско-Российского университетов» (ДС от 08.07.21 № 075-03-2021-050/5).

1. C. Tackenberg, A. Ghorji, and R. Brandt, "Thin, Stubby or Mushroom: Spine Pathology in Alzheimers Disease," *Curr. Alzheimer Res.*, vol. 6, no. 3, pp. 261–268, Jun. 2009, doi: 10.2174/156720509788486554.
2. E. Popugaeva *et al.*, "Derivatives of Piperazines as Potential Therapeutic Agents for Alzheimer's Disease," *Mol. Pharmacol.*, vol. 95, no. 4, pp. 337–348, 2019, doi: 10.1124/mol.118.114348.
3. D. Landis and T. Reese, "Cytoplasmic organization in cerebellar dendritic spines," *J. Cell Biol.*, vol. 97, no. 4, pp. 1169–1178, 1983, doi: 10.1083/JCB.97.4.1169.
4. O. Trott, and A. J. Olson. "AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading." *J. of comp. chem.* vol.31, no.2, pp. 455-461, 2010.
5. D. Van Der Spoel, *et al.* "GROMACS: fast, flexible, and free." *Journal of computational chemistry* vol. 26, no.16, pp. 1701-1718, 2005.
6. Biovia, Dassault Systèmes. "Discovery studio modeling environment." 2017.
7. V. Ghamaryan, *et al.*, "Program development for the conformation analysis and visualization of the results of molecular docking using clustering methods" *Vestnik RAU*, 1. pp.165-176, 2021
8. A. R. Qian *et al.*, "Fractal dimension as a measure of altered actin cytoskeleton in MC3T3-E1 cells under simulated microgravity using 3-D/2-D clinostats," *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, vol. 59, no. 5, pp. 1374–1380, May 2012, doi: 10.1109/TBME.2012.2187785.

Определение наличия липидных капель в семенниках особей *Drosophila melanogaster* с нарушенной функцией гена *swiss cheese*

Е.А. Иванова, Н.В. Сурина, С.В. Саранцева

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

Липидные капли (ЛК) – это внутриклеточные органеллы, основной функцией которых является хранение нейтральных липидов, в первую очередь сложных эфиров холестерина или триацилглицеридов [1]. Данные органеллы обнаружены у большого числа организмов: животных, растений, грибов и бактерий. Они состоят из ядра, заполненного нейтральными липидами, окруженное монослоем фосфолипидов, а на их поверхности содержится множество белков, большая часть которых участвует в липидном обмене [2]. Помимо своей основной функции, ЛК участвуют в накоплении энергии, поддержании энергетического гомеостаза, а также управляют клеточным стрессом, однако эти органеллы до сих пор остаются изученными недостаточно.

В настоящее время в исследованиях биологии липидных капель используется широкий спектр модельных систем, в том числе плодовая мушка *Drosophila melanogaster*. Геном дрозофилы содержит ген *swiss cheese* (*sws*), который является эволюционно-консервативным (ортолог данного гена у человека - ген *NTE*). Известно, что кодируемый им белок SWS выполняет функцию фосфолипазы В, которая проявляется в гидролизе (лизо)фосфатидилхолина на мембранах клетки и ЭПС до глицерофосфохолина и (одной) двух жирных кислот [3], что дает возможность предположить, что он является активным участником липидного обмена.

Ранее была обнаружена довольно высокая экспрессия данного гена в половой системе самцов, что вызвало интерес изучить роль липидных капель в семенниках особей с нарушенной функцией данного гена.

В данной работе были использованы особи *Drosophila melanogaster* с мутацией в гене *swiss cheese* (*sws*¹) и особи дикого типа (*CantonS*) в качестве контроля. Липидные капли в семенниках были идентифицированы с помощью специфичного к нейтральным липидам красителя – BODIPY^{493/503}, проанализировано их распределение и количество.

1. Welte, M. A. As the fat flies: The dynamic lipid droplets of *Drosophila* embryos / M.A. Welte // Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular and Cell Biology of Lipids. – 2015. – Vol.1851, №. 9. – P. 1156-1185.
2. Welte, M. A. Lipid droplet functions beyond energy storage / M.A. Welte, A.P. Gould // Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular and Cell Biology of Lipids. – 2017. – Vol.1862, №.10. – P.1260–1272.
3. Loss of Swiss cheese/neuropathy target esterase activity causes disruption of phosphatidylcholine homeostasis and neuronal and glial death in adult *Drosophila* / M. Mühlig-Versen [et al.] // Journal of Neuroscience. – 2005. – Vol.25, №11. – P. 2865-2873.

Роль внеклеточного матрикса в процессе биоминерализации CaCO₃ бактерией *V. licheniformis*

Л.А. Иванова¹, Д.В. Лебедев¹, В.В. Егоров^{1,2}, А.А.Кульминская^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинов, Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Гатчина
² Курчатовский геномный центр - ПИЯФ, Гатчина

Биоминерализация - феномен образования минералов живыми организмами в результате реакций их продуктов обмена с окружающей средой. Карбонат кальция является одним из самых распространенных материалов на Земле, являясь основным компонентом известняка, мрамора, мела, травертина, доломита. Процесс микробно-индуцированного осаждения (МИСО) привлек большое внимание исследователей по разным причинам: в биотехнологии такой процесс нужно не только инициировать, но и ингибировать. С одной стороны, на основе МИСО разрабатываются технологии по восстановлению бетонных конструкций, которые можно «ремонттировать», используя осажденный бактериями карбонат кальция [1]. С другой стороны, в клинической медицине существует проблема блокирования неорганическими кристаллами, образованными минералоосаждающими бактериями, мочевыводящих катетеров, что приводит к тяжелым осложнениям, в том числе к летальному исходу [2]. Несмотря на необходимость понимания для управления процессом МИСО, на сегодняшний день механизм образования кристаллов бактериальными клетками все еще остается не до конца изученным: появление центра кристаллизации и начальный рост кристаллов карбоната кальция являются наиболее дискуссионными вопросами. Кроме того, не показана роль внеклеточного матрикса (ВКМ) в процессе МИСО.

В ранее проведенном скрининге штаммов бактерий, способных к МИСО, мы обнаружили, что наиболее эффективной культурой для образования кристаллов карбоната кальция был штамм *Bacillus licheniformis* DSMZ 8782 [3]. В настоящей работе с помощью ряда микроскопических методов: световой, атомно-силовой и конфокальной микроскопии с использованием специфических флуоресцентных красителей был подробно показан процесс образования CaCO₃ бактерией *V. licheniformis* на разных стадиях формирования ВКМ в планктонной культуре, а также роль отдельных компонентов ВКМ (внеклеточной ДНК, амилоидов и полисахаридов) в процессе кристаллизации биогенных минералов.

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

1. Ortega-Villamagua E., Gudiño-Gomezjurado M., Palma-Cando A. Microbiologically Induced Carbonate Precipitation in the Restoration and Conservation of Cultural Heritage Materials.// *Molecules*. 2020. 25(23):5499.
2. Li X., Lu N., Brady H.R., Packman A.I. Ureolytic Biomineralization Reduces *Proteus mirabilis* Biofilm Susceptibility to Ciprofloxacin// *Antimicrob Agents Chemother*. 2016. 60(5):2993-3000
3. Golovkina D.A., Zhurishkina E.V., Ivanova L.A., Baranchikov A.E., Sokolov A.Y., Bobrov K.S., Masharsky A.E., Tsvigun N.V., Kopitsa G.P., Kulminskaya A.A. Calcifying Bacteria Flexibility in Induction of CaCO₃ Mineralization// *Life (Basel)*. 2020. 10(12):317.

Изучение белков TnpB транспозонов семейства IS605 из *Escherichia coli* и *Deinococcus radiodurans*

М.А. Казалов¹, Я.В. Федорова¹

¹ ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, Санкт-Петербург

Мобильные генетические элементы – транспозоны – являются неотъемлемой частью геномов различных организмов. Транспозоны, принадлежащие к семейству IS200/IS605, отличаются от большинства транспозонов по механизму их транспозиции, требуя для вырезания и вставки одноцепочечные ДНК-субстраты, и несут характерные шпильки вместо нуклеотидных повторов на 5' и 3' концах. Это семейство включает элементы, кодирующие только транспозазу (TnpA), либо ещё и дополнительные гены: так, известный транспозон ISDra2 из *Deinococcus radiodurans* содержит второй ген, TnpB, необязательный для транспозиции, функция которого до конца неизвестна^{1,2}.

Биоинформатический анализ показывал, что белки TnpB из IS605 являются предками РНК-направляемых эндонуклеаз Cas12f. Эти нуклеазы в комплексе с направляющими РНК входят в состав бактериальных защитных систем CRISPR/Cas, которые способны вносить двухцепочечный разрыв в ДНК-мишень, специфически узнавая её за счёт комплементарного спаривания с направляющей кРНК. Используя программу AlphaFold2, мы предсказали структуру TnpB белков. Оказалось, что она крайне похожа на решенную структуру Cas12f, а белки TnpB, по-видимому, также работают в форме димеров. Анализ последовательности генов TnpB позволяет обнаруживать в них консервативные участки, предположительно кодирующие направляющие РНК, которые могут быть использованы для транспозиции.

Действительно, в сентябре 2021 года вышла статья Н. Altae-Tran et al., где была продемонстрирована нуклеазная активность TnpB из организмов *Alicyclobacillus macrosporangiidus* и *Actinoplanes lobatus*. Оказалось, для узнавания ДНК-мишени эти белки используют направляющие РНК, закодированные в конце гена TnpB. Этот широкий класс нуклеаз, кодируемых транспозонами, имеет потенциал для использования в области биотехнологий³.

Мы занимаемся изучением TnpB из *Escherichia coli* и *Deinococcus radiodurans*. Можно предположить, что эти белки имеют такую же активность, как и их охарактеризованные ортологи. Попытки получить рекомбинантные версии этих белков не увенчались успехом. Поэтому нами были синтезированы плазмидные конструкции, содержащие гены TnpB из *Escherichia coli* и *Deinococcus radiodurans* для гетерологической экспрессии их генов и изучения их влияния на жизнедеятельность клетки.

Оказалось, что индуцированный синтез белка TnpB в *Escherichia coli* приводит к образованию необычных кластеров в клетке бактерии. Такие кластеры создают затемнённые чередующиеся области внутри бактерий при рассмотрении клеток под микроскопом, и отличны от телец включения. Такие чередующиеся затемнения коррелируют с очаговым накоплением ДНК в клетке. Мы предполагаем, что эти кластеры связаны с приостановкой репликационных вилок в клетке, связанных с действием TnpB.

Работа поддержана грантом РФФ № 21-14-00122.

1. Pasternak, C., Dulermo, R., Ton-Hoang, B., Debuchy, R., Siguier, P., Coste, G., Chandler, M. and Sommer, S. (2013), TnpB-mediated inhibition of ISDra2 transposition. *Molecular Microbiology*, 88: 443-455. <https://doi.org/10.1111/mmi.12194>.
2. Pasternak C, Ton-Hoang B, Coste G, Bailone A, Chandler M, Sommer S. Irradiation-induced *Deinococcus radiodurans* genome fragmentation triggers transposition of a single resident insertion sequence. *PLoS Genet*. 2010 Jan 15;6(1):e1000799. doi: 10.1371/journal.pgen.1000799. PMID: 20090938; PMCID: PMC2806898.
3. Altae-Tran, H. et al. *Science* <https://doi.org/10.1126/science.abj6856> (2021).

Поиск генетического варианта, ассоциированного с буллёзным эпидермолизом и врожденным множественным артрогрипозом

А.Е. Комиссаров¹, А.Д. Слободина¹, Е.Э. Слепнева¹, С.В. Саранцева¹

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

Буллёзный эпидермолиз — группа генетически и клинически гетерогенных заболеваний, характеризующаяся образованием пузырей и эрозий на коже и слизистых оболочках, ранимостью кожи и её чувствительностью к незначительным механическим травмам. Выделяют четыре типа буллезного эпидермолиза, один из которых простой буллёзный эпидермолиз. Он является наиболее распространенным и легкопротекающим типом, на который приходится около половины всех случаев данной патологии. Большинство случаев заболевания вызвано генетическими вариантами в генах *KRT5* или *KRT14*, кодирующих кератины, в основном экспрессирующиеся в базальном слое эпидермиса. Простой буллезный эпидермолиз наследуется преимущественно по аутосомно-доминантному типу, хотя сообщалось и об аутосомно-рецессивных формах, которые составляют около 5% всех случаев.

Помимо буллезного эпидермолиза у рассматриваемого пациента поставлен диагноз врожденный множественный артрогрипоз. Артрогрипоз характеризуется контрактурой и деформацией конечностей, недоразвитием суставов и мышц, а также фиброзом. На сегодняшний момент обнаружено более 150 генов, генетические варианты в которых ассоциированы с развитием контрактур, а именно с артрогрипозом [1].

Таким образом, в данной работе был обследован пациент с диагнозом простой буллезный эпидермолиз и врожденный множественный артрогрипоз. Из-за сложности диагноза, а также из-за широкого спектра генетических вариантов, ассоциированных с данными заболеваниями, у пациента было проведено полноэкзомное секвенирование на платформе HiSeq 2500 (Illumina).

В ходе работы была выявлена в гене *KRT14* однонуклеотидная замена rs60725382. Эта замена Т/А в позиции 612 гена *KRT14* приводит к возникновению стоп-кодона ТАА. Данная мутация в гомозиготном состоянии уже была описана в статьях [2,3] как патогенная и ассоциированная с развитием БЭ. Мутация ассоциированная с врожденным множественным артрогрипозом на данный момент не определена.

1. Hall J. G., Kiefer J. Arthrogyriposis as a syndrome: gene ontology analysis //Molecular syndromology. – 2016. – Т. 7. – №. 3. – С. 101-109.
2. Chan Y. et al. A human keratin 14" knockout": the absence of K14 leads to severe epidermolysis bullosa simplex and a function for an intermediate filament protein //Genes & development. – 1994. – Т. 8. – №. 21. – С. 2574-2587.
3. Yiasemides E. et al. Clinical heterogeneity in recessive epidermolysis bullosa due to mutations in the keratin 14 gene, KRT14 //Clinical and Experimental Dermatology: Clinical dermatology. – 2008. – Т. 33. – №. 6. – С. 689-697.

Исследование влияния количества регуляторного белка на эффективность защиты клеток с системой рестрикции-модификации II типа Esp1396I

О. А. Котовская¹, А.А. Кириллов¹, Н. Е. Морозова¹

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

Системы рестрикции-модификации II типа обеспечивают защиту бактерий от фаговой инфекции за счёт активности двух независимых ферментов: эндонуклеаз рестрикции и метилтрансфераз [1]. Эндонуклеазы рестрикции катализируют реакцию гидролиза ДНК вблизи (или внутри) определённого участка узнавания (сайта рестрикции), но такое разрезание может произойти не только с чужеродной ДНК бактериофага, но и с ДНК клетки-хозяина. Для предотвращения этого существуют метилтрансферазы, катализирующие реакцию метилирования азотистых оснований ДНК так, что появление метильной группы в области сайта рестрикции затрудняет гидролиз молекулы ДНК. Метилирование собственной ДНК позволяет бактериям избежать негативного эффекта эндонуклеаз рестрикции. Но при этом чрезмерная активность метилтрансфераз при попадании ДНК бактериофага в клетку может привести к модификации чужеродной ДНК и последующей гибели бактерии в процессе вирусной инфекции. Поэтому важную роль в работе системы рестрикции-модификации играет регуляция транскрипции генов эндонуклеазы рестрикции и метилтрансферазы [2].

В системе рестрикции-модификации II типа Esp1396I регуляция транскрипции генов осуществляется с помощью регуляторного белка (С-белка) [3]. С-белок связывается с ДНК в области промотора оперона, состоящего из генов регуляторного белка и эндонуклеазы рестрикции *esp1396ICR*, и промотора гена метилтрансферазы *esp1396IM* [2], [4]. В результате связывания С-белка с промоторной областью *esp1396IM* происходит ингибирование транскрипции гена метилтрансферазы за счёт затруднения посадки РНК-полимеразы в области промотора [5]. В промоторной области оперона *esp1396ICR* существует два сайта связывания (в дистальной и проксимальной области промотора) разной аффинности [3], [4]. Связывание С-белка с высокоаффинной проксимальной областью промотора приводит к активации транскрипции *esp1396ICR*, а связывание С-белка с низкоаффинной дистальной областью промотора приводит к тетрамеризации белка и ингибированию транскрипции *esp1396ICR* [4]. Такой механизм контроля транскрипции системы рестрикции-модификации по типу обратной связи позволяет осуществлять эффективную защиту клеток от инвазивной ДНК.

Ранее нами изучалось поведение системы Esp1396I, в которой эндонуклеаза рестрикции и метилтрансфераза слиты с флуоресцентными белками [5]. Это позволило получить данные, описывающие временную динамику накопления белков системы рестрикции-модификации на уровне одной клетки. Но эти данные не дают представления о том, сколько регуляторного белка содержится в клетке и как его количество влияет на работу системы.

Для того, чтобы проверить, как дополнительно экспрессируемый белок влияет на динамику транскрипции белков системы рестрикции-модификации, мы собрали конструкцию, представляющую из себя регуляторный С-белок, слитый с флуоресцентным белком mNeonGreen. В работе изучается, как различные количества дополнительно экспрессируемого флуоресцентно-меченного белка влияют на динамику накопления флуоресцентно-меченных эндонуклеазы рестрикции и метилтрансферазы, а также на эффективность защиты клеток от заражения вирусом бактериофагом λ.

1. Tock M. R. and Dryden D. T. F., "The biology of restriction and anti-restriction," *Curr. Opin. Microbiol.*, vol. 8, no. 4, pp. 466–472, Aug. 2005, doi: 10.1016/J.MIB.2005.06.003.
2. Ball N.J., McGeehan J.E., Streeter S.D., Thresh S.J., and Kneale G.G., "The structural basis of differential DNA sequence recognition by restriction-modification controller proteins," *Nucleic Acids Res.*, vol. 40, no. 20, pp. 10532–10542, Nov. 2012, doi: 10.1093/NAR/GKS718.
3. Bogdanova E. *et al.*, "Transcription regulation of restriction-modification system Esp1396I," *Nucleic Acids Res.*, vol. 37, no. 10, p. 3354, 2009, doi: 10.1093/NAR/GKP210.
4. Martin R. N. A., McGeehan J. E., Ball N. J., Streeter S. D., Thresh S.-J., and Kneale G. G., "Structural analysis of DNA–protein complexes regulating the restriction–modification system Esp 1396I," *Acta Crystallogr. Sect. F Struct. Biol. Cryst. Commun.*, vol. 69, no. 9, pp. 962–966, Sep. 2013, doi: 10.1107/S174430911302126X.
5. Morozova N. *et al.*, "Temporal dynamics of methyltransferase and restriction endonuclease accumulation in individual cells after introducing a restriction-modification system," *Nucleic Acids Res.*, vol. 44, no. 2, p. 790, Jan. 2016, doi: 10.1093/NAR/GKV1490.

Экстраклеточные везикулы плазмы крови пациентов с тяжелой формой COVID-19

Д.Г. Кулабухова^{1,2}, Л.А. Гараева¹, М.А. Николаев¹, Е.Г. Гаврилова², И.В. Шпак², О.В. Сироткина^{1,2}, С.Н. Пчелина^{1,2}

¹ФБГУ «Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова Национального Исследовательского Центра «Курчатовский Институт», Гатчина

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

Коронавирусная инфекция (COVID-19) – респираторное заболевание, вызванное вирусом SARS-CoV-2. В настоящее время нет однозначного подхода к лечению данного заболевания. Пациенты, которые имеют сопутствующие осложнения, такие как диабет и сердечно-сосудистые заболевания, подвержены высокому риску неблагоприятного исхода течения заболевания. Патогенез COVID-19 до конца неизвестен. Понимание молекулярных механизмов распространения вирусной инфекции в организме человека важно для поисков новых подходов к лечению инфекции.

Экстраклеточные везикулы (ЭВ) участвуют в межклеточном транспорте [1]. В настоящее время показано, что ЭВ могут переносить вирусные компоненты, включая белки и мРНК [2], что может способствовать развитию заболевания. Так же получены данные о том, что присутствие тетраспанина CD9, который является поверхностным маркером экзосом, облегчает проникновение вируса в клетку [3]. Одним из осложнений при тяжелом течении инфекции, вызванной вирусом атипичной пневмонии (SARS-CoV), является развитие коагулопатии [4]. Было показано, что ЭВ плазмы крови пациентов с COVID-19 имеют в основном тромбоцитарное и лейкоцитарное происхождение, что говорит об активации системы свертывания крови [5]. Однако нет данных о количестве ЭВ плазмы крови у пациентов с разным исходом течения COVID-19.

Таким образом, целью нашей работы была оценка характеристик пула ЭВ плазмы крови (концентрация и размер) у пациентов с тяжелой формой COVID-19, умерших и выживших в результате заболевания.

В исследование было включено 29 пациентов с тяжелой формой COVID-19. Забор крови проводили в момент поступления пациента в реанимацию, перед началом терапии. Пациенты были разделены на две группы в соответствии с исходом заболевания (реконвалесценция – 15 человек, средний возраст $58,7 \pm 11,4$ лет, 11 мужчин и 4 женщины/летальный исход – 14 человек, средний возраст $60,3 \pm 8,8$ лет, 11 мужчин и 3 женщины). Плазма периферической крови была получена путем центрифугирования в течение 20 минут при 3000 об/мин. ЭВ выделяли методом последовательного ультрацентрифугирования (УЦ). Оценка концентрации и размера ЭВ проводилась методом анализа тректории наночастиц (НТА). Статистический анализ был выполнен с использованием программного обеспечения SPSS 12.0.

В ходы выполнения работы были получены ЭВ плазмы крови пациентов с тяжелой формой COVID-19, с разделением на группы с учетом исхода заболевания (реконвалесценция/летальный исход). Проведена оценка концентрации и размера полученных ЭВ плазмы крови методом НТА. Различий в размере и концентрации частиц выявлено не было. Средняя концентрация ЭВ плазмы крови пациентов, умерших в результате COVID-19, составила $6,08 (1,2 - 16,03) \cdot 10^{13}$ частиц/мл, пациентов, выписанных из реанимации – $6,6 (1,3 - 17,9) \cdot 10^{13}$ частиц/мл. Средний размер ЭВ плазмы крови пациентов, умерших в результате COVID-19, составил $99,8 (82,3 - 111)$ нм, пациентов, выписанных из реанимации – $94,3 (80,6 - 103,6)$ нм.

Изменение концентрации ЭВ плазмы крови не является предиктором тяжести заболевания у пациентов с тяжелой формой COVID-19.

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

1. Hassanpour M., Rezaie J., Nouri M., Panahi Y. The role of extracellular vesicles in COVID-19 virus infection. *Infect. Genet. Evol.* 2020, 85:104422;
2. Adam Fleming, Gavin Sampey, Myung Chul Chung, Charles Bailey, Monique L. van Hoek, Fatah Kashanchi, Ramin M. Nakami, The carrying pigeons of the cell: exosomes and their role in infectious diseases caused by human pathogens. *Pathogens and Disease.* 2014, 71(2):109–120;
3. James T. Earnest, Michael P. Hantak, Kun Li, Paul B. McCray Jr, Stanley Perlman, Tom Gallagher. The tetraspanin CD9 facilitates MERS-coronavirus entry by scaffolding host cell receptors and proteases. *PLoS Pathog.* 2017, 13:e1006546;
4. Terpos E., Ntanasis-Stathopoulos I., Elalamy I. et al. Hematological findings and complications of COVID-19. *Am J Hematol.* 2020;95(7):834-847;
5. Сироткина О.В., Ермаков А.И., Гайковская Л.Б., Кудлай Д.А., Вавилова Т.В. Микрочастицы клеток крови у больных COVID-19 как маркер активации системы гемостаза. *Тромбоз, гемостаз и реология*, 2020, 4:35-40.

Сравнительная характеристика частоты мутаций в генах *DNMT3A* и *ASXL1* при миелодиспластическом синдроме и остром миелоидном лейкозе

Е.Д. Кулаева¹, П.В. Липилкин², Е.В. Машкина¹, Ю.В. Шатохин²

¹*Южный Федеральный университет, Академия биологии и биотехнологии им. Д.И. Ивановского, кафедра генетики, лаборатория генетики человека и животных, Ростов-на-Дону*

²*Ростовский государственный медицинский университет, кафедра гематологии и трансфузиологии с курсами клинической лабораторной диагностики, генетики и лабораторной генетики ФПК и ППС, Ростов-на-Дону*

В 2021 году, согласно данным, предоставленным Центром экспертизы и контроля качества медицинской помощи, в России на оплату молекулярно-генетических исследований при онкологических заболеваниях, заложено более 2 млрд рублей [1], но одной из проблем таких исследований является недостаточная представленность данных по связи частот мутаций, выживаемости пациентов и значений клинически значимых показателей. Этот тезис справедлив и для таких заболеваний, таких как миелодиспластический синдром (МДС) и острый миелоидный лейкоз (ОМЛ). Для данных заболеваний существует перекрывающееся множество часто мутирующих генов, среди которых присутствуют гены, ответственные за эпигенетическую регуляцию: *DNMT3A*, кодирующий субъединицу А ДНК-метилтрансферазы 3, и *ASXL1*, кодирующий одноименный белок, регулирующий процессы транскрипции и эпигенетической регуляции в комплексе с белками Polycomb. В данных генах при указанных выше заболеваниях наблюдаются частые мутации – R882H и с.1934dupG соответственно [2,3], и существует ряд работ, рассматривающих значимость этих мутаций в прогностическом ключе отдельно друг от друга [3,4]. Исследование частоты мутаций в генах *DNMT3A* и *ASXL1* при МДС и ОМЛ является актуальным для определения значимости указанных соматических мутаций, влияющих на развитие заболевания, а также для создания молекулярно-генетической системы оценки тяжести МДС и ОМЛ в дополнение к существующим шкалам оценки.

Целью исследования являлось определение частот мутаций R882H в гене *DNMT3A* и с.1934dupG в гене *ASXL1* в образцах периферической крови пациентов с МДС и ОМЛ методами рестрикционного анализа и анализа эффективности амплификации (FC) соответственно.

Образцы ДНК были получены из периферической крови 62 пациентов, которым в период с сентября 2019 по декабрь 2020 года поставили диагноз в клинике РостГМУ и городской больнице №7 г. Ростова-на-Дону. Пациенты были разделены на группы в зависимости от поставленного диагноза – ОМЛ и МДС.

Для выделения ДНК из периферической крови использовали набор реагентов «ДНК-ЭКСТРАН-1». ПЦР для амплификации фрагментов генов *DNMT3A* и *ASXL1* осуществляли с использованием мастер-микса «БиоМастер LR HS-ПЦР (2x) для амплификации длинных (до 30 кб) и сложных фрагментов ДНК». Рестрикцию продукта амплификации фрагмента гена *DNMT3A* проводили с помощью рестриктазы Fsp4NI. Разделение продуктов амплификации осуществляли методом горизонтального гелеэлектрофореза в 2,5 % агарозном геле.

В ходе исследования не было обнаружено мутации R882H ни у одного из пациентов из исследуемых групп. Были получены различающиеся на уровне тенденции частоты мутации с.1934dupG в гене *ASXL1* у пациентов с диагностированным ОМЛ и МДС (80,65 %; 58,06 %; $p = 0,054$).

В результате анализа кривых выживаемости с помощью теста Мантела-Кокса статистически значимых различий в выживаемости у пациентов с МДС при наличии или отсутствии мутации с.1934dupG не было выявлено ($p = 0,56$). Также было проанализировано влияние мутации с.1934dupG на такие показатели общего анализа крови (ОАК), как содержание лейкоцитов, эритроцитов, тромбоцитов, а также на содержание бластов в костном мозге (КМ). В результате не было выявлено значимого влияния мутации с.1934dupG в гене *ASXL1* на показатели ОАК и содержание бластов в КМ у пациентов с МДС.

В случае пациентов с ОМЛ анализ кривых выживаемости с помощью теста Мантела-Кокса была выявлена лишь тенденция к снижению выживаемости ($p = 0,09$), не являющаяся статистически значимой. Также не было выявлено влияния мутации с.1934dupG в гене *ASXL1* на показатели ОАК и содержание бластов в КМ у пациентов с ОМЛ.

Дополнительно было проанализировано содержание бластов в периферической крови (ПК) как номинативный показатель с помощью критерия Хи-квадрат. Было установлено, что мутация с.1934dupG статистически значимо связана с повышенным риском наличия бластов в периферической крови у пациентов с ОМЛ (ОШ 7.33 (1.16-41.00), $p = 0,03$).

Можно заключить, что мутация с.1934dupG в гене *ASXL1* ассоциирована с повышенным риском наличия бластов в ПК у пациентов с острым миелоидным лейкозом. Стоит отметить, что, согласно клиническим рекомендациям, диагностика ОМЛ базируется на оценке морфологических особенностей клеток КМ и ПК и диагноз устанавливается лишь при обнаружении в них бластов (в частности, более 20 % в КМ), и в целом, наличие бластов в ПК может быть связано с более тяжелым течением заболевания.

Работа была поддержана стипендией Альфа-Банка «Альфа-Шанс» и грантом Фонда содействия инновациям «УМНИК» (Соглашение № 16236Г/2021 от 11.05.2021).

1. В 2021 г. более 2 млрд. рублей заложено на оплату молекулярно-генетических тестов для онкологических заболеваний в рамках базовой программы ОМС, однако в большинстве регионов данные исследования не смогут быть реализованы в полном объеме. 15 апреля 2021. <https://rosmedex.ru/oplata-molekulyarno-geneticheskix-testov/>

2. Martín I. et al. Prognostic impact of gene mutations in myelodysplastic syndromes with ring sideroblasts //Blood cancer journal. – 2017. – Т. 7. – №. 12. – С. 1-4.

3. Montes-Moreno S. et al. Clinical molecular testing for *ASXL1* с. 1934dupG p. Gly646fs mutation in hematologic neoplasms in the NGS era //PloS one. – 2018. – Т. 13. – №. 9.

4. Walter M. J. et al. Recurrent *DNMT3A* mutations in patients with myelodysplastic syndromes //Leukemia. – 2011. – Т. 25. – №. 7. – С. 1153-1158.

Изучение функций хроматин-ремоделирующего фактора CHD1 на модели дозовой компенсации у *Drosophila melanogaster*

Я.А. Кучинская¹, Ж.А. Репинская^{1,2}, А.Ю. Конев¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина

² СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург

Хорошей моделью для изучения координированного изменения уровня транскрипции является процесс дозовой компенсации (ДК) у модельного организма *Drosophila melanogaster*. ДК позволяет выровнять уровни экспрессии дозочувствительных генов как между гомо- и гетерогаметным полом, так и между половыми хромосомами и аутосомами. В случае самцов дрозофила происходит направленное увеличение экспрессии X-хромосомных генов примерно в два раза, которое обеспечивается тонкой работой как генетических, так и эпигенетических инструментов регуляции. Основную функцию в соматических клетках выполняет комплекс дозовой компенсации (MSL: male-specific lethal), включающий в себя белки MSL1-MSL3, ацетилтрансферазу MOF, РНК геликазу MLE и две длинные некодирующие РНК (roX1 и roX2). Данный комплекс, взаимодействуя с белком-адаптером (CLAMP: chromatin-linked adaptor for MSL proteins), связывается со специфическим мотивом сайтов введения в хроматин (Chromatin Entry Sites - CES) на X-хромосоме [1]. Предметом нашего исследования является консервативный белок CHD1 (chromodomain-helicase-DNA-binding protein 1) и его возможные функции в процессе ДК. Предпосылкой для этой работы послужил факт сильной деформации и деконденсации X-хромосомы у самцов самцов дрозофила на фоне мутации кодирующего его гена *Chd1* [2]).

Метод иммуноокрашивания политенных хромосом позволил нам обнаружить практически полную ко-локализацию фактора CHD1 и компонентов комплекса MSL (таких как MOF, MSL1 и 2), а также ассоциированного с ним JIL-1 киназного комплекса (белок JASPER) на X-хромосоме у самцов дрозофила, в случае самцов нуль-мутантов по гену *Chd1* весь соответствующий белок материнского происхождения связывается исключительно с половой хромосомой [3]. Важно отметить, что с компонентом JIL-1 киназного комплекса не происходило совпадения локализации на аутосомах, т.е. оба фактора привлекаются к X-хромосоме по одной и той же причине – вероятно для участия в процессе ДК. Кроме того, для самцов дикого типа характерно повышенное обогащение X-хромосомы данным фактором по сравнению с аутосомами и X-хромосомами самок. Для факторов Brahma, kismet и ISWI таких специфических особенностей распределения не наблюдается ни у дикого типа, ни на фоне мутации гена *chd1*. При этом распределение у мутантных самцов таких белков как PAF1 (у дрожжей комплекс PAF участвует в рекрутировании фактора CHD1 [4]) и NSL1 (входит в состав комплекса NSL: non-specific lethal вместе с MOF) также не было отличным от такового у дикого типа. Из полученных нами данных следует, что белок CHD1 играет специфическую роль в процессе ДК у *Drosophila melanogaster*.

Также нами было проведено сравнение уровней экспрессии roX1 и roX2 у нуль-мутантных самцов и дикого типа методом ПЦР в реальном времени. В образцах, полученных из личинок третьего возраста нами не обнаружено различий для roX1, но в случае roX2 наблюдается тенденция к увеличению уровня экспрессии у нуль-мутантов. Образцы, полученные нами из голов четырехдневных имаго, также показали существенные изменения уровней только в случае roX2. Данный аспект работы требует дальнейшего изучения для понимания закономерностей изменения уровней экспрессии roX1-2.

Кроме того, в некоторых случаях нами были отмечены нарушения паттерна распределения MSL комплекса. Во-первых, такая картина наблюдается при нарушении нормального функционирования компонентов комплекса: так на фоне РНК-интерференции MOF происходило связывание с аутосомными сайтами, при этом на X-хромосоме пропадало специфическое обогащение CHD1. Во-вторых – при сверхэкспрессии трансгенов, кодирующих либо каталитически не активную форму белка CHD1 (P{UAST-Chd1(KR)559}), либо белок дикого типа (P{UAST-Chd1(wt)}). Высокие уровни экспрессии в обоих вариантах ведут к сильной деформации и деконденсации всех хромосом у обоих полов [3], хотя в случае белка дикого типа деконденсации подвергаются и участки гетерохроматина, образующие хромоцентр политенных хромосом. На X-хромосоме самцов вне зависимости от типа трансгена нарушается специфическая ко-локализация фактора CHD1 и комплекса MSL и также обнаружены не характерные для данного комплекса аутосомные сайты связывания.

Работа поддержана грантом РФФИ № 20-04-00864.

1. Conrad, T. and Akhtar, A. Dosage compensation in *Drosophila melanogaster*: epigenetic fine-tuning of chromosome-wide transcription // *Nat Rev Genet*, – 2012. – V. 13. – No. (2). – P. 123-134.
2. Конев А.Ю., Тютюнник, А.А., and Барановская, И.Л. Влияние мутации гена *Chd1*, кодирующего фактор сборки и ремоделирования хроматина, на организацию политенных хромосом дрозофила. // *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.
4. Simic, R., D. L. Lindstrom, H. G. Tran, K. L. Roinick, P. J. Costa, A. D. Johnson, G. A. Hartzog and K. M. Arndt (2003). "Chromatin remodeling protein Chd1 interacts with transcription elongation factors and localizes to transcribed genes." *EMBO J* 22(8): 1846-1856.

The role of *swiss cheese* gene in higher metazoan fitness

P.A. Melentev, E.G. Sharapenkov, N.V. Surina, A.E. Komissarov, D.R. Zhmujdina, E.A. Ivanova, S.I. Timoshenko, E.V. Ryabova, S.V. Sarantseva

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

Orthologues of the *Drosophila melanogaster* *swiss cheese* gene are discovered in pro- and eukaryotes, and they encode proteins with the conservative PNPLA6 domain which acts as a phospholipase, cleaving primarily lysophosphatidylcholine. Metabolism of this substrate is vital for cells, and various cells use different adaptive physiological reactions in cases of defective biological turnover of lysophosphatidylcholine. For instance, *Saccharomyces cerevisiae* with knockdown of the gene that encodes PNPLA6-contained protein reorganise phosphatidylcholine metabolism in a way that do not disturb their growth or cell cycle. In the frames of our study, we proved *swiss cheese* to be expressed in the digestive system and fat tissue of the fruit fly *Drosophila melanogaster*. Surprisingly, functional knockout of the gene did not induce any visible changes in these organs, meaning again that some cells can totally avoid survival problems without PNPLA6 activity. However, higher metazoans seem to be dependent on this gene role in the organism, especially in the nervous and reproductive systems. In case of downregulation *swiss cheese* function in nervous and glial cells of *Drosophila melanogaster*, the specific reaction develops with endoplasmic reticulum stress, changes in mitochondria shape and quantity, reactive oxygen species acceleration, lipid droplets accumulation [1]. These findings suggest that the multifactorial response to a decline of lysophospholipase activity exists, which is associated with not only lipid metabolism disturbance. It leads to neurodegeneration, reduction of longevity, decrease in locomotor activity and cognitive abilities. Moreover, we are the first to demonstrate that the expression of wild type *swiss cheese* is important for imago reproduction. Functional knockout of the gene induces not only neurogenic phenotypes, affecting male sex behaviour, but also it alters male fertility and female fecundity. We propose that products of *swiss cheese* expression influence on male germ cells via somatic line in testes. All things considered we showed the role of *swiss cheese* in fitness of the fruit fly. It seems that such conclusion may be widened to other Metazoa, including humans. This idea is supported by the data that downregulation of PNPLA6 function in men leads to severe abnormalities of physical activity and is also accompanied with curable infertility in several cases [2]. We conclude these phenomena to have directed natural selection of evolutionary conservation of PNPLA6 function.

The reported study was funded by RFBR, project number 20-34-90148.

1. Melentev P. A. et al. Loss of *swiss cheese* in Neurons Contributes to Neurodegeneration with Mitochondria Abnormalities, Reactive Oxygen Species Acceleration and Accumulation of Lipid Droplets in *Drosophila* Brain //International journal of molecular sciences. – 2021. – V. 22. – №. 15. – P. 8275.
2. Melentev P. A., Agranovich O. E., Sarantseva S. V. Human diseases associated with *NTE* gene //Ecological genetics. – 2020. – V. 18. – №. 2. – P. 229-242.

Действие липосом, содержащих астаксантин, на секрецию мононуклеарными клетками крови цитокинов IL-17A и TNF α

И.К. Малашенкова^{1,2}, Д.П. Огурцов¹, С.А. Крынский¹, Н.Ю. Лотош¹, Е.П. Куликов¹, А.Р. Акулова¹, С.Н. Москвина¹, А.А. Селищева¹, Н.А. Дидковский²

¹НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

²ФГБУ ФНКЦ физико-химической медицины, Москва

Астаксантин (АСТ) относится к группе каротиноидов – природных органических пигментов и обладает антиоксидантными свойствами. В отдельных исследованиях обнаружено, что этот каротиноид может блокировать окисление липопротеина низкой плотности, увеличивать содержание липидов высокой плотности и адипонектина, снижать уровень воспаления. По данным одного исследования *in vitro*, АСТ снижал продукцию воспалительных белков TNF α , PGE-2, IL-1 β , NO, фермента Cox-2, транскрипционного фактора NF κ B [1, 2]. Показано также, что астаксантин обладает иммуномодулирующим действием. В культуре клеток он стимулирует продукцию лимфоцитами цитокинов IL-2 и IFN γ , которые необходимы для запуска и реализации противовирусного адаптивного иммунного ответа [3]. Следует отметить, что мало работ, в которых бы изучали нейропротективную и иммуномодулирующую активность эфиров АСТ, которые могут иметь большую эффективность, чем астаксантин.

Учитывая современные представления о молекулярных механизмах патогенеза болезни Альцгеймера, в развитии которой большую роль играют процессы избыточной активации микроглии, нарушения иммунитета и окислительный стресс, которые стимулируют и поддерживают нейровоспаление и нейродегенерацию, перспективно изучение астаксантина в качестве потенциального терапевтического средства при болезни Альцгеймера. Поскольку астаксантин плохо растворим в воде, актуально создание и изучение липосомальной формы астаксантина и его эфиров.

Целью данной работы было исследование действия липосом, содержащих астаксантин и его эфиры, на секрецию IL-17A и TNF α *in vitro* (мононуклеарные клетки крови).

Мононуклеарные клетки (МНК) 8 здоровых добровольцев, давших добровольное информированное согласие на участие в исследовании, выделяли из периферической крови человека в одноступенчатом градиенте плотности фиколл-урографина. Для подсчета выделенных из периферической крови мононуклеарных клеток использовали камеру Горяева. Для дальнейшей работы использовали МНК периферической крови в концентрации 1×10^6 /мл. Клетки стимулировали ФГА в концентрации 5,0 мкг/мл. Так же к клеткам добавляли липосомы, содержащие эфиры астаксантина (фосфатидилхолин 4 мг/мл + эфир 0,025 мг/мл) или свободный астаксантин (фосфатидилхолин 4 мг/мл + эфир 0,025 мг/мл). После стимуляции клетки культивировали в течение 24 и 48 часов в CO₂-инкубаторе (t=37 \pm 0,5 \circ C, CO₂ 5%). В качестве контроля использовали МНК, культивированные только в полной среде RPMI 1640 и с добавлением липосом (фосфатидилхолин 4 мг/мл) без астаксантина. По окончании культивирования МНК осаждали центрифугированием (15 минут, 1000 об/мин). Отбирали супернатанты и замораживали их при -70 \circ C. Для определения концентрации цитокинов IL-17A и TNF α в супернатантах клеточных культур использовали коммерческие наборы для иммуоферментного анализа ООО «Цитокин». Для статистической обработки результатов использовали критерий Манна-Уитни, различия между группами считали достоверными при p<0,05.

Была выявлена противовоспалительная активность липосом, содержащих эфиры астаксантина (фосфатидилхолин 4 мг/мл + АСТ эфир) *in vitro* на мононуклеарных клетках здоровых добровольцев, активированных фитогемагглютинином. Обнаружено, что инкубация клеток в течение 48 часов с липосомами указанного состава уменьшает более чем в 10 раз (p<0,05) стимулированную фитогемагглютинином продукцию клетками провоспалительного цитокина интерлейкина-17 (IL-17), в то время как инкубация с липосомами, содержащими астаксантин, и липосомами без включения астаксантина и его эфиров не оказывает достоверного эффекта.

Также выявлено, что инкубация клеток в течение 24 ч. с липосомами, содержащими астаксантин (фосфатидилхолин 4 мг/мл + АСТ 0,25мг/мл) уменьшает более чем 2 раза (p<0,05) стимулированную ФГА продукцию клетками провоспалительного цитокина фактора некроза опухоли- α (TNF α), в то время как инкубация с липосомами, содержащими эфиры астаксантина, и липосомами без включения астаксантина и его эфиров не вызывает такого эффекта.

IL-17A – важнейший цитокин, секретируемый Th17-клетками – одной из основных субпопуляций CD4+ Т-хелперов. В настоящее время получены данные о роли IL-17A в развитии ряда аутовоспалительных и нейродегенеративных заболеваний, включая ревматоидный артрит, псориаз, болезнь Альцгеймера, болезнь Паркинсона, рассеянный склероз, боковой амиотрофический склероз, глаукому. Имеются данные, что IL-17A стимулирует механизмы нейродегенерации, проникая через гематоэнцефалический барьер и вызывая патологическую активацию микроглиальных клеток [4]. Модулирующее влияние эфиров астаксантина на секрецию этого цитокина показано впервые. TNF α – один из ключевых провоспалительных цитокинов, стимулирует механизмы нейровоспаления и повышает проницаемость гематоэнцефалического барьера, при повышенных концентрациях оказывает токсическое воздействие на нейроны и нарушает функции микроглии [5].

Таким образом, инкубация с астаксантином и его эфирами значительно снизила продукцию и секрецию мононуклеарными клетками крови цитокинов фактора некроза опухоли α и интерлейкина 17 соответственно, которые, как показывают данные мировой литературы, участвуют в патогенезе болезни Альцгеймера и развитии когнитивной недостаточности [4]. Причины избирательного воздействия липосом, содержащих астаксантин, на секрецию TNF α , а содержащих его эфиры – на секрецию IL-17A нуждаются в дальнейшем изучении.

Проведение исследования одобрено Этическим комитетом НИЦ «Курчатовский Институт», протокол от 11.03.2021.

Работа выполнена при поддержке Национального исследовательского центра «Курчатовский Институт» (приказ № 1361 от 25 июня 2019 г.).

1. Kishimoto Y., Tani M., Uto-Kondo H., Iizuka M., Saita E., H. Sone H., Kurata H., Kondo K. Astaxanthin suppresses scavenger receptor expression and matrix metalloproteinase activity in macrophages // *Eur J Nutr.* – 2010. – Vol. 49, №2. – P. 119-126.
2. Ristow M. Unraveling the Truth About Antioxidants: Mitohormesis explains ROS-induced health benefits // *Nature Medicine.* – 2014. – Vol. 20, №7. – P. 709-711.
3. Jyonouchi H., Sun S., Iijima K., Gross M. D. Antitumor Activity of Astaxanthin and Its Mode of Action // *Nutr Cancer.* – 2000. – Vol. 36. – P. 59-65.
4. Chen J., Liu X., Zhong Y. Interleukin-17A: The Key Cytokine in Neurodegenerative Diseases // *Front Aging Neurosci.* – 2020. – Vol.12 – P. 1-13.
5. Chang R., Knox J., Chang J., Derbedrossian A., Vasilevko V., Cribbs D., Boado R.J., Partridge W.M., Sumbria R. Blood-Brain Barrier Penetrating Biologic TNF- α Inhibitor for Alzheimer's Disease // *Mol Pharm.* – 2017. – Vol. 14 №7 – P.2340-2349

Экспрессия генов *ANXA2*, *CD-36* в лимфоцитах периферической крови пациентов с тяжелым течением COVID-19

М.А. Николаев^{1,2}, А.И. Безрукова¹, Д.А. Богданова¹, А.Д. Изюмченко¹, Е.Г. Гаврилова², И.В. Шлык², Т.С. Усенко^{1,2}, С.Н. Пчелина^{1,2}

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

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

Коронавирусная инфекция (COVID-19) — это контагиозное инфекционное заболевание, вызванное тяжелым острым респираторным синдромом, коронавирусом 2 (SARS-CoV-2), оказало катастрофическое влияние на мировую демографию (1). В настоящее время продолжается интенсивное изучение клинических и эпидемиологических особенностей COVID-19. Появление данного заболевания в мире поставило новые задачи, связанные с быстрой диагностикой, а также прогнозированием течения и исхода заболевания у пациентов (2). Ранее нами было показано, что тяжелое течение COVID-19 сопровождается изменением уровня мРНК генов *ANXA2*, *CD-36*, *LDLR*, *LRP6*, *STAB1* (неопубликованные данные), вовлеченных в метаболический путь, регулирующий активность рецептора липопротеиновых частиц низкой плотности. Однако, для подтверждения этих данных необходимо провести валидацию выявленных генов с использованием ПЦР в режиме реального времени.

Цель данного исследования заключается в оценке и валидации, с данными ранее проведенного транскриптомного анализа, уровня экспрессии генов в лимфоцитах периферической крови у пациентов с COVID-19 с различными исходами (реконвалесценция/летальный исход).

Материалы и методы: тотальная РНК была выделена из лимфоцитов периферической крови пациентов с COVID-19 с различными исходами (реконвалесценция N=10/летальный исход N=10) с использованием набора для выделения РНК RNeasy Mini Kit (Qiagen, 74104, США). Чистота выделенных образцов РНК была оценена спектрофотометрически. Целостность фракций рибосомальной РНК была оценена при помощи электрофореза в 1% агарозном геле. кДНК была получена методом обратной транскрипции с использованием набора Revert Aid First cDNA Synthesis kit (K1622, Thermo scientific, Литва) согласно условиям производителя сразу после выделения РНК. Уровень мРНК выбранных генов для проведения валидационного исследования по результатам анализа транскриптома была оценена в лимфоцитах периферической крови методом ПЦР в режиме реального времени с использованием зондов TaqMan. В качестве референсных генов были использованы конститутивно экспрессирующиеся в клетках ген *RPLP0* (Ribosomal Protein Lateral Stalk Subunit P0), а также ген *ACTB* (beta actin). Каждый образец был исследован в трех повторах. Уровень мРНК исследуемых генов оценивался с использованием метода 2-ΔΔCt. Статистическая обработка данных проводилась с применением непараметрического критерия Манна-Уитни в программе SPSS 21.0. Значения $p < 0.05$ считались статистически значимыми.

Результаты: был оценен относительный уровень экспрессии генов *ANXA2* (0,01236 (0,00001-0,41709)/0,00676 (0,00047-0,70674) медиана (мин-макс)) и *CD36* (0,02191 (0,00299- 0,07377)/0,01996 (0,00016-0,06204) медиана (мин-макс)) у пациентов с COVID-19 с различными исходами (реконвалесценция/летальный исход). Значимых различий в уровне экспрессии генов *ANXA2* и *CD36* в зависимости от исхода не наблюдалось ($p=0.635$ и $p=0.323$ соответственно).

Выводы: в ходе данного исследования впервые была оценена экспрессия генов (*ANXA2*, *CD-36*), выявленных по результатам анализа транскриптома (не опубликованные данные) в лимфоцитах периферической крови пациентов с COVID-19 с различными исходами заболевания и которые потенциально могут вносить вклад в отягощенное течение COVID-19. Значимых различий не было обнаружено. Однако это может быть связано с сравнительно небольшой выборкой пациентов на данном этапе исследования. Кроме того, необходимо провести оценку и сопоставление уровня экспрессии оставшихся генов (*LDLR*, *LRP6*, *STAB1*) выявленных в ходе транскрипционного анализа (не опубликованные данные), которые могут оказывать более выраженное влияние на течение и исход заболевания у пациентов с COVID-19.

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

1. Berekaa MM. Insights into the COVID-19 pandemic: Origin, pathogenesis, diagnosis, and therapeutic interventions. *Front Biosci (Elite Ed)*. 2021;13:117-139.
2. Fang FC, Benson CA, Del Rio C, et al. COVID-19-Lessons Learned and Questions Remaining. *Clin Infect Dis*. 2021;72(12):2225-2240

Динамические тубулиновые микротрубочки регулируют форму и структуру постсинаптических контактов нейронов

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

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Лаборатория молекулярной нейродегенерации, Санкт-Петербург, Россия

²Юго-Западный медицинский центр университет Техаса, Даллас, штат Техас, США

Со стороны аксона синапс формируется аксональным бутоном, а со стороны дендрита – дендритным шипиком, специализированным выростом нейрональной мембраны. Дендритные шипики характеризуются большим разнообразием форм и размеров, которые в сильной степени варьируются между различными отделами мозга, типами клеток и видами животных. Цитоскелет дендритных шипиков формируется актином, но прижизненная микроскопия продемонстрировала, что динамические тубулиновые микротрубочки, покрытые на плюс-конце белком EB3, временно входят в дендритный шипик и этот процесс сопровождается его увеличением [1, 2]. Гиперэкспрессия белка EB3 в первичных гиппокампальных нейронах вызывает значительное увеличение процента дендритных шипиков грибовидного типа, которые характеризуются наибольшим размером головки и способностью формировать сильную синаптическую связь. Гиперэкспрессия EB3 также восполнила дефицит дендритных шипиков грибовидного типа в гиппокампальных нейронах, полученных из мышей линии PS1-M146V-KI, экспрессирующих белок Пресенилин 1 с мутацией, характерной для наследственной формы болезни Альцгеймера (БА) [3]. В данной *in vitro* модели БА не происходит накопления бета-амилоида – основного компонента сенильных бляшек. Одна из задач исследования – более детально оценить влияние EB3 на морфологию дендритных шипиков, путем анализа их ключевых морфологических параметров, в норме и в условиях амилоидной токсичности. В электронеозбудимых клетках комплекс белков STIM1-EB1 регулирует движение эндоплазматического ретикула (ЭР) в клетке посредством tip-attachment complex, когда трубочка ЭР крепится и движется вместе с растущим концом тубулиновой микротрубочки [4]. В нейронах гомолога STIM2, широко экспрессирующийся в гиппокампальных нейронах и специфичный для зрелых дендритных шипиков, взаимодействуют с белком EB3 [3]. Согласно электронной микроскопии 80% гиппокампальных шипиков грибовидного типа имеют включение ЭР внутри них [5]. Задачей данного исследования является оценить влияние уровней экспрессии белка EB3 на количество дендритных шипиков, содержащих ЭР, и размер ЭР внутри шипиков.

Для визуализации морфологии нейроны трансфицировались плазмидой, кодирующей флуоресцентный белок GFP, на 8-9 день культивирования *in vitro* (DIV). Для визуализации эндоплазматического ретикула нейроны ко-трансфицировались плазмидой GFP и плазмидой DsRed-ER, вызывающей экспрессию красного флуоресцентного белка в эндоплазматическом ретикуле клетки, на 8-9 DIV. Условия низкой амилоидной токсичности моделировались на 14 DIV путем добавления в среду для культивирования олигомерной фракции пептидов Ab42 (в течение 72 часов). На 17 DIV нейроны фиксировались 2% раствором параформальдегида в фосфатном буфере в течение 8 минут с целью минимизации влияния фиксирующего раствора на структуру эндоплазматического ретикула. Изображения, иллюстрирующие морфологию эндоплазматического ретикула и нейрона, были получены с помощью конфокального микроскопа Thorlabs с 100-кратным увеличением (NA 1.4, Olympus). Обработка изображений проводилась в программе ImageJ и 3dSpAn. Наложение двумерной проекции максимальной интенсивности серии конфокальных изображений из двух каналов использовалась для определения процента дендритных шипиков, содержащих ЭР, и поперечного размера ЭР. Для анализа морфологических характеристик дендритных шипиков нейронов использовалось трёхмерное изображение нейрона, составленное из серии двумерных срезов с шагом по оси z 100нм.

Анализ основных параметров, характеризующих форму дендритных шипиков, продемонстрировал значительное увеличение размера головки шипика при гиперэкспрессии белка EB3. В условиях низкой амилоидной токсичности наблюдалось уменьшение размера головки шипика, которое восстанавливалось до нормальных значений, зафиксированных в контрольной группе, при гиперэкспрессии белка EB3. Таким образом, белок EB3 продемонстрировал нейропротекторные свойства в условиях низкой амилоидной токсичности, моделирующих начальные стадии болезни Альцгеймера *in vitro*. Анализ морфологии ЭР продемонстрировал, что гиперэкспрессия EB3 вызывает значительное увеличение размера структуры эндоплазматического ретикула, находящегося в дендритном шипике, и числа дендритных шипиков, содержащих эндоплазматический ретикулум. Эндоплазматический ретикулум внутри дендритного шипика может формировать специализированную клеточную органеллу – шипиковый аппарат, характерный для зрелых синаптических контактов. Полученные данные позволяют сделать предположение, что в нейрональных клетках STIM2-EB3 регулирует движение ЭР в дендритных шипиках посредством tip-attachment complex, в дополнение к основному механизму движения ЭР с помощью моторного белка миозина [6].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-15-00184.

1. Jaworski J., Kapitein L. C., Gouveia S. M., Dortland B. R., Wulf P. S., Grigoriev I., Camera P., Spangler S. A., Di Stefano P., Demmers J., Krugers H., Defilippi P., Akhmanova A., Hoogenraad C. C. Dynamic microtubules regulate dendritic spine morphology and synaptic plasticity // *Neuron*. 2009. Т. 61, № 1. С. 85-100.
2. Hu X., Viesselmann C., Nam S., Merriam E., Dent E. W. Activity-Dependent Dynamic Microtubule Invasion of Dendritic Spines // *The Journal of Neuroscience*. 2008. Т. 28, № 49. С. 13094-13105.
3. Pchitskaya E., Kraskovskaya N., Chernyuk D., Popugaeva E., Zhang H., Vlasova O., Bezprozvanny I. Stim2-Eb3 Association and Morphology of Dendritic Spines in Hippocampal Neurons // *Sci Rep*. 2017. Т. 7, № 1. С. 017-17762.
4. Pavez M., Thompson A. C., Arnott H. J., Mitchell C. B., D'Atri I., Don E. K., Chilton J. K., Scott E. K., Lin J. Y., Young K. M., Gasperini R. J., Foa L. STIM1 Is Required for Remodeling of the Endoplasmic Reticulum and Microtubule Cytoskeleton in Steering Growth Cones // *J Neurosci*. 2019. Т. 39, № 26. С. 5095-5114.
5. Spacek J., Harris K. M. Three-Dimensional Organization of Smooth Endoplasmic Reticulum in Hippocampal CA1 Dendrites and Dendritic Spines of the Immature and Mature Rat // *The Journal of Neuroscience*. 1997. Т. 17, № 1. С. 190-203.
6. Wagner W., Brenowitz S. D., Hammer J. A. Myosin-Va Transports the Endoplasmic Reticulum into the Dendritic Spines of Purkinje Neurons // *Nature cell biology*. 2011. Т. 13, № 1. С. 40-48.

Взаимодействия фибробластов с клетками колоректального рака в 2- и 3-мерных клеточных моделях

О.А. Ракитина^{1,2}, Д.А. Дидыч², И.В. Алексеенко^{1,2}, А.И. Кузьмич^{1,2}

¹ФГБУ Институт молекулярной генетики НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва

Взаимодействия раковых и стромальных клеток в настоящее время активно изучаются [1–3]. Одним из типов стромальных клеток являются опухоль-ассоциированные фибробласты, или ОАФ [4,5]. Такие взаимодействия происходят в опухолях, однако, их изучение непосредственно в организме затруднено. В связи с этим, используются различные модели, например, 2D и 3D ко-культуры этих типов клеток. Так как условия в двумерных и трехмерных клеточных моделях значительно отличаются по множеству параметров [6], характер взаимодействия клеток в таких моделях также может сильно различаться. Целью данной работы было сравнить изменения экспрессии отдельных генов, происходящие при ко-культивации клеток рака толстого кишечника различной инвазивности и фибробластов человека в 2- и 3-мерных клеточных моделях.

В ходе данной работы клетки колоректального рака (линии HT29 или SW480), предварительно окрашенные флуоресцентным красителем DiD, и фибробласты кожи (ФК), предварительно окрашенные флуоресцентным красителем DiO, ко-культивировали на пластике (2-мерная модель) либо в коллагеновом геле (3-мерная модель) в течение 5 суток, после чего анализировали клеточный состав ко-культур с помощью проточной цитофлуориметрии. Затем ко-культивированные клетки разделяли с помощью FACS, из полученных суспензий клеток выделяли тотальную РНК и анализировали экспрессию выбранных генов методом ОТ-ПЦР. В качестве контроля в экспериментах использовались раковые клетки HT29 или SW480 и ФК, культивируемые по отдельности в 2- или 3-мерных моделях.

В результате анализа состава клеточных популяций 2- и 3-мерных ко-культур было выявлено, что при ко-культивации обнаруживаются популяции клеток, захватывающих материал от другого типа клеток, окрашенный липофильным красителем. При этом в ко-культурах более-эпителиальных раковых клеток HT29 возникала одна такая «гибридная» популяция, представляющая собой гибридные ФК, а в ко-культурах более-мезенхимальных раковых клеток SW480 возникали уже две такие гибридные популяции, т.е. гибридные раковые клетки и гибридные ФК. Интересно, что доля таких гибридных популяций в 2-мерных ко-культурах была в несколько раз выше, чем в 3-мерных ко-культурах.

Выбор генов для анализа экспрессии методом ОТ-ПЦР производился на основе полученных ранее данных RNA-seq для ко-культур тех же клеток в коллагеновом геле [7]. Были выбраны гены, экспрессия которых существенно изменялась при такой ко-культивации в раковых клетках или ФК. Для обеих изучаемых линий раковых клеток при их ко-культивации с фибробластами в 2-мерной модели не наблюдалось увеличения экспрессии генов, активация которых наблюдалась при 3-мерной ко-культивации. В случае фибробластов усиление экспрессии только 4 из 8 активирующихся при 3-мерной ко-культивации генов наблюдалось в 2-мерной модели для обеих ко-культур. Увеличение экспрессии генов-маркеров ОАФ в фибробластах кожи наблюдалось только при их ко-культивации с раковыми клетками в коллагеновом геле. Таким образом, изменение экспрессии выбранных генов как в раковых клетках, так и в ФК, было более выражено в 3-мерной модели. Можно предположить, что 3-мерные модели ко-культивации раковых и стромальных клеток более адекватны для изучения раково-стромальных взаимодействий *in vitro*.

1. Labernadie A. и др. A mechanically active heterotypic E-cadherin/N-cadherin adhesion enables fibroblasts to drive cancer cell invasion // Nat. Cell Biol. 2017. Vol. 19, № 3. P. 224–237.

2. Luo M. и др. Cancer-associated fibroblasts accelerate malignant progression of non-small cell lung cancer via connexin 43-formed unidirectional gap junctional intercellular communication // Cell. Physiol. Biochem. 2018. Vol. 51, № 1. P. 315–336.

3. Miyazaki K. и др. Collective cancer cell invasion in contact with fibroblasts through integrin- $\alpha 5\beta 1$ /fibronectin interaction in collagen matrix // Cancer Sci. Blackwell Publishing Ltd, 2020. P. cas.14664.

4. Alekseenko I. V. и др. Are synapse-like structures a possible way for crosstalk of cancer with its microenvironment? // Cancers (Basel). 2020. Vol. 12, № 4. P. 1–16.

5. Emon B. и др. Biophysics of Tumor Microenvironment and Cancer Metastasis - A Mini Review // Computational and Structural Biotechnology Journal. Elsevier B.V., 2018. Vol. 16. P. 279–287.

6. Kapałczyńska M. и др. 2D and 3D cell cultures – a comparison of different // Arch. Med. Sci. 2016. Vol. 14, № 4. P. 910–919.

7. Druzhkova I. и др. Expression of emt-related genes in hybrid e/m colorectal cancer cells determines fibroblast activation and collagen remodeling // Int. J. Mol. Sci. 2020. Vol. 21, № 21. P. 1–26.

Гиперэкспрессия белка EB3 восстанавливает плотность кластеров белка Synapsin в клеточной модели болезни Альцгеймера

А.В. Раковская¹, Е.И. Пчицкая¹, И.Б. Безprozванный¹

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

Болезнь Альцгеймера (БА) - наиболее распространенное неизлечимое нейродегенеративное заболевание, которое влияет на процессы формирования и хранения памяти. Наблюдается значительная потеря пресинаптических маркеров синапсина у лиц в начале когнитивного снижения на ранней стадии прогрессирования БА [1]. Также детектированы нарушения структуры и динамики тубулинового цитоскелета при БА, которые являются одним из факторов, запускающих дегенеративные изменения дендритных шипиков нейронов и их последующую потерю. Недавние исследования выявили временное проникновение динамических микротрубочек (МТ) в дендритный шипик, которое вызывает увеличение его размера и модулирует синаптическую пластичность [2]. Дистальный конец растущей МТ, входящей в шипик, покрыт белком end-binding protein 3 (EB3), который является нейрон-специфичным членом семейства белков EB [3]. Ранее продемонстрировано, что гиперэкспрессия EB3 увеличивает количество грибовидных шипиков на мышинной модели БА PS1-M146V-KI, в которой отсутствует накопление бета-амилоида [4]. Однако нейропротекторное влияние белка EB3, стабилизирующего микротрубочки, до сих остается недостаточно изученным. В данном исследовании рассматривается связь между уровнем экспрессии белка EB3 и кластеризацией пресинаптического белка Synapsin, в том числе в условиях, характерной для БА, амилоидной токсичности.

Для исследования влияния гиперэкспрессии и нокаута белка EB3 на площадь и плотность распределения кластеров пресинаптического белка Synapsin в первичных гиппокампальных нейронах, культура клеток заражалась лентивирусными частицами на 7-8 день культивирования *in vitro* (DIV), и фиксировалась 4% раствором параформальдегида в фосфатном буфере на 15-16 день культивирования *in vitro*. Амилоидная токсичность моделировалась путем аппликации олигомерных форм бета-амилоида. Иммуоцитохимическое окрашивание проводилось антителами к Synapsin (1/300), MAP2 (1/1000) и вторичными антителами Alexa Fluor 488 (1/1000) и Alexa Fluor 594 (1/1000). Обработка серии конфокальных изображений, полученных на микроскопе Thorlabs (2016 × 2016 пиксела, разрешение 0,034 мкм/пиксел), производилась в программном обеспечении ImageJ. Детекция кластеров производилась на изображениях, характеризующих распределение белка Synapsin. Изображения обрабатывались фильтром «Rolling ball» для уменьшения шума, после чего проводилась локальная бинаризация с помощью плагина Adaptive 3D Threshold 1.22 с использованием следующих параметров: $r=2$, $C=160$, локальный вес=5%. Плотность и размер кластеров подсчитывались в программном обеспечении Synpanal [5].

Гиперэкспрессия белка EB3 увеличивает плотность кластеров белка Synapsin в дендритах гиппокампальных нейронов. Также продемонстрировано стабилизация плотности кластеров при вирус-опосредованной гиперэкспрессии белка EB3 с добавлением бета-амилоидов до значений контрольной группы. В результате проведенных исследований выявлено, что белок EB3 крайне важен для стабилизации синаптических контактов и предотвращает развитие дегенеративных изменений в нейронах в условиях низкой амилоидной токсичности.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 19-15-00184 (Безprozванный И.Б.).

1. Synaptic change in the posterior cingulate gyrus in the progression of Alzheimer's disease / S. W. Scheff, D. A. Price, M. A. Ansari, K. N. Roberts, F. A. Schmitt, M. D. Ikonovic, E. J. Mufson // J Alzheimers Dis. 2015. № 43(3). С. 1073-1090
2. Dent E.W. Of microtubules and memory: implications for microtubule dynamics in dendrites and spines // Mol Biol Cell. 2017. № 28(1). С. 1-8.
3. B3, a novel member of the EB1 family preferentially expressed in the central nervous system, binds to a CNS-specific APC homologue / H. Nakagawa, K. Koyama, Y. Murata, M. Morito, T. Akiyama, Y. E. Nakamura // Oncogene. 2000. №19(2). С. 210-216.
4. Stim2-Eb3 Association and Morphology of Dendritic Spines in Hippocampal Neurons / E. Pchitskaya, N. Kraskovskaya, D. Chernyuk, E. Popugaeva, H. Zhang, O. Vlasova, I. Bezprozvanny // Scientific Reports. 2017. № 1 (7). С. 1–13.
5. Danielson E, Lee SH. SynPanal: Software for Rapid Quantification of the Density and Intensity of Protein Puncta from Fluorescence Microscopy Images of Neurons // PLOS ONE. 2014. № 9(12): e115298.

Исследование влияния хроматин-ремоделлирующего фактора CHD1 на экспрессию генов X-хромосомы самцов вида *Drosophila melanogaster*

Ж.А. Репинская^{1,2}, Я.А. Кучинская², А.Ю. Конев²

¹ СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург

² НИЦ «Курчатовский институт» -- ПИЯФ, Гатчина

Для эукариотических организмов характерна упаковка наследственного материала в многоуровневую структуру – хроматин. В его состав входят ДНК, гистоны и не гистоновые (архитектурные) белки. Плотность упаковки генетического материала коррелирует с уровнем транскрипционной активности участка генома. Транскрипционно активный хроматин называют эухроматином, тогда как гетерохроматин более конденсирован и характеризуется репрессией генов [1]. Для каждого из этих типов характерны определенные особенности структуры и организации – наличие определенных вариантов гистонов, модификаций и т.д. Хроматин не статичен и постоянно подвержен влиянию различных ферментов и комплексов, так функцию позиционирования нуклеосом и перераспределения гетеро- и эухроматина в ядре могут выполнять АТФ-зависимые хроматин-ремоделлирующие факторы. Одним из таких ферментов является интересующий нас высококонсервативный белок CHD1, функции которого связаны с преобразованиями активно транскрибируемого хроматина.

Эпигенетические процессы, направленные на изменение уровня экспрессии определенных сайтов, могут быть изучены на модели дозовой компенсации (ДК) у модельного организма *Drosophila melanogaster*. Процесс ДК направлен на выравнивание экспрессии генов между гомо- и гетерогаметным полом, а также между половыми хромосомами и аутосомами. У дрозофилы этот процесс выражен в увеличении экспрессии генов единственной X-хромосомы самцов примерно в два раза в основном за счет работы комплекса дозовой компенсации (MSL: male-specific lethal) [2]. В рамках изучения фактора CHD1 на данной модели уже было показано специфическое изменение X-хромосомы самцов на фоне мутации гена *Chd1* в купе со специфическим связыванием белка материнского происхождения с этой же хромосомой [3],[4].

С целью изучения влияния хроматин-ремоделлирующего фактора CHD1 на экспрессию генов X-хромосомы самцов *D. melanogaster* мы сравнили полученные методом РНК-секвенирования соответствующие профили экспрессии представителей контрольной линии (Canton-S) и нуль-мутантов по гену *chd1*. Исследования проводили с помощью программ для анализа данных РНК-секвенирования, использованных в виде пайплайна: FastQC [5] для оценки качества ридов, Trimmomatic [6] для улучшения качества данных, Salmon [7] индексирования транскриптома и последующего выравнивания на него ридов и Bioconductor RStudio [8] для анализа дифференциальной экспрессии и визуализации. Результаты работы будут представлены в стендовом докладе.

Работа поддержана грантом РФФИ № 20-04-00864

1. Babu A., Verma R.S. Chromosome Structure: Euchromatin and Heterochromatin // International Review of Cytology. 1987. Гл. 108. С. 1—60.
2. Conrad, T. and Akhtar, A. Dosage compensation in *Drosophila melanogaster*: epigenetic fine-tuning of chromosome-wide transcription // Nat Rev Genet, – 2012. – V. 13. – No. (2).– P. 123-134.
3. Конев А.Ю., Тютюнник, А.А., and Барановская, И.Л. Влияние мутации гена *Chd1*, кодирующего фактор сборки и ремоделлирования хроматина, на организацию политенных хромосом дрозофилы. // Цитология, – 2016. – V. 58. – No. (4).– P. 281-4.
4. 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.
5. FastQC – A quality control tool for high throughput sequence data e [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.bioinformatics.babraham.ac.uk/projects/fastqc/>, свободный. – (дата обращения: 17.09.2021).
6. Bolger A.M., Lohse M, Usadel B. Trimmomatic: a flexible trimmer for Illumina sequence data // Bioinformatics. 2014. С. 2114—2120.
7. Salmon: fast and bias-aware quantification of transcript expression using dual-phase inference / R. Patro [и др.] // Nat Methods. 2017. С. 417—419.
8. Love M.I., Huber W., Anders S. Moderated estimation of fold change and dispersion for RNA-seq data with DESeq2 // Genome Biology. 2014. № 15. С. 550.

Цитогенетические нарушения в костном мозге, старение организма и развитие опухолей в отдаленный период после облучения мышей быстрыми нейтронами в низких дозах

А. Н. Романцова, Д.А. Шапошникова, О.В. Высоцкая, Ю. П. Семочкина, А.С. Дегтярёв

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва

Биологические эффекты низких доз нейтронного излучения, особенно отдаленные последствия облучения нейтронами, остаются мало изученными. В то же время в лучевой терапии в настоящее время используются пучки фотонов высоких энергий, когда возможно появление вторичного нейтронного излучения, а также развивается лучевая терапия с использованием нейтронов и нейтрон-захватной нейтронной терапии. При этом пациенты и медицинский персонал могут получать низкие дозы нейтронного излучения. Кроме того воздействию нейтронов могут подвергаться космонавты на высоких орбитах при солнечных вспышках в результате взаимодействия протонов с материалом корабля [1]. Действие нейтронов характеризуется высоким коэффициентом ОБЭ, который при оценке по критериям снижения митотического индекса и образования аберраций хромосом в клетках костного мозга после общего облучения мышей быстрыми нейтронами с энергией 1,5 МэВ в дозах 0,25-2,5 Гр при мощности дозы 0,239 Гр/с составлял от 4,1 до 7,3 [2]. Вопрос о возможности появления генетических нарушений при облучении животных быстрыми нейтронами в диапазоне низких доз при низкой мощности дозы излучения практически не изучен. Не изучен также вопрос о появлении при таком облучении отдаленных последствий таких, как развитие опухолей и старение организма. В связи с этим целью настоящей работы явился анализ уровня цитогенетических повреждений в клетках костного мозга, анализ частоты развития опухолей и появления признаков старения у животных, после пролонгированного облучения быстрыми нейтронами в низких дозах. В качестве маркера репликативного старения анализировали длину теломер в клетках костного мозга и тимуса.

В экспериментах использовали мышей линий C57Bl/6 и CBA в возрасте 7-8 недель, массой 18–21 г. Облучение мышей проводили на установке «ОР-М» НИЦ «Курчатовский институт» с использованием нескольких Pu-Be радионуклидных источников в поле нейтронов и сопутствующих гамма-квантов. Энергетические спектры излучения измерены с помощью цифрового спектрометра-дозиметра нейтронов и гамма-квантов. Суммарная мощность дозы нейтронов и гамма-квантов с энергией выше 0,1 МэВ составила $2,13 \times 10^{-3}$ Гр/ч, при этом на нейтроны приходилось три четверти мощности поглощенной дозы – 0,00157 Гр/ч. Для анализа частоты клеток с микроядрами выделяли костный мозг из берцовых костей контрольных мышей через 24 ч после окончания облучения. Приготовление и анализ препаратов костного мозга осуществляли по методу [3] после фиксации и окрашивания мазков клеток с использованием азур и эозина. Исследование мазков клеток костного мозга и подсчет клеток с микроядрами проводили с помощью световой микроскопии. По каждой мышце рассчитывали процентное соотношение ретикулоцитов и эритроцитов и частоту ретикулоцитов с микроядрами. Определение абсолютной длины теломер проводили, используя ПЦР в реальном времени по методу [4,5]. Геномную ДНК выделяли из препаратов костного мозга и тимуса, которые хранили до исследования при -80°C . Для расчёта средней длины теломер на диплоидный геном мыши нормировали длину теломерных повторов на количество копий гена $m\beta$ -Actin: т.п.н. теломер/количество копий $m\beta$ -Actin, что соответствует длине теломер в т.п.н./геном. Для контроля появления опухолей регулярно раз в месяц проводили осмотр животных. Вскрытие животных проводили через 1 год и 2 месяца после окончания облучения. Для гистологического исследования кусочки опухолей фиксировали в 10% нейтральном формалине, затем подвергали обычной гистологической обработке с заливкой в парафин. Срезы толщиной 5 мкм окрашивали гематоксилин-эозином. Микроскопию препаратов проводили на микроскопе Axio Imager D2.

Показано, что пролонгированное облучение мышей быстрыми нейтронами при низкой мощности дозы в дозах от 0,01 до 0,5 Гр приводило к статистически значимому повышению частоты появления ретикулоцитов с микроядрами через 24 ч после облучения при всех указанных дозах, зависимости повышения этого показателя от дозы облучения в этом диапазоне не наблюдали. При дозе 0,01 Гр этот показатель снижался до уровня контроля уже к 48 ч, а при 0,5 Гр оставался повышенным даже через 72 ч. При исследовании влияния γ ,n-облучения мышей в низких дозах на развитие репликативного старения в тканях с высокой скоростью пролиферации клеток при анализе длины теломер в клетках костного мозга и тимуса через 2 месяца и через 1 год после облучения в дозах 0,01-0,5 Гр показано, что через 2 месяца после облучения изменения в длине теломер в клетках и костного мозга и тимуса облучённых мышей отсутствуют. Но спустя 1 год после γ ,n-облучения в дозах 0,1-0,5 Гр было обнаружено снижение длины теломер в клетках костного мозга, а в тимусе снижение длины теломер обнаружено только после облучения в дозе 0,5 Гр. В клетках костного мозга мышей линии CBA спустя 1 год после γ ,n-облучения было обнаружено снижение длины теломер при более низких дозах 0,01-0,1 Гр. Таким образом, пролонгированное γ ,n-облучение мышей в низких дозах приводит в отдалённый период к развитию репликативного старения клеток костного мозга при действии на мышей уже в очень низких дозах. При обследовании и пальпировании контрольных и облучённых животных на протяжении 1 года и 2 мес после γ ,n-облучения опухоли обнаружены не были. При вскрытии животных у 6 из 10 облучённых в дозе 0,5 Гр мышей линии CBA обнаружены новообразования в печени и у 1 из 10 мышей, облучённых в дозе 0,05 Гр обнаружена опухоль легкого. У 2 из 10 облучённых в дозе 0,5 Гр мышей линии C57Bl/6 обнаружена опухоль матки. При гистологическом исследовании опухолей обнаружено, что очаги новообразования в печени имели характерные признаки гемангиомы и гистиосаркомы, что позволяет классифицировать их как гемангиосаркому. Опухоли матки представляли собой ороговевающую плоскоклеточную карциному.

Таким образом, при пролонгированном γ ,n-облучении мышей в низких дозах в диапазоне от 0,01 до 0,5 Гр обнаружено появление цитогенетических нарушений в костном мозге по повышению частоты ретикулоцитов с микроядрами, что свидетельствует о биологической опасности γ ,n-излучения даже в таких низких дозах. В отдаленный период после γ ,n-облучения обнаружено репликативное старение клеток костного мозга при дозах 0,1–0,5 Гр, и клеток тимуса при дозе 0,5 Гр. Развитие опухолей наблюдали только при более высоких дозах – 0,1 и 0,5 Гр. Полученные данные свидетельствуют о высокой генетической опасности действия низких доз пролонгированного γ ,n-излучения и высокой вероятности развития опухолей в отдаленный период после такого воздействия.

1. Goodhead D.T. Neutrons are forever! Historical perspectives // Intern J Radiat Biol. 2019. V. 95. №7. P. 1-80.
2. Ворожцова С.В., Булынина Т.М., Иванов А.А. Цитогенетические эффекты в костном мозге мышей после облучения быстрыми нейтронами // Авиакосмическая и экологическая медицина. 2016. Т. 50. №1. С. 55-60.
3. Schmid W. The Micronucleus test // Mutat Res. – 1975. V. 31. №1. P. 9-15.
4. Cawthon R.M. Telomere measurement by quantitative PCR // Nucleic Acids Res. 2002. V. 30. № 10. P. 47.
5. O'Callaghan N.J., Fenech M. A quantitative PCR method for measuring absolute telomere length // Biol Proced Online. 2011. V. 13. P. 1-10.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1059 от 02.07.2020 г.)
Анализ амилоидогенных свойств ряда транскрипционных факторов, участвующих в онкогенезе

М.В. Рябина¹, А.А. Зелинский¹, А.А. Рубель^{1,2}, Ю.О. Чернов^{1,3}

¹ *Лаборатория биологии амилоидов, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург*

² *Кафедра генетики и биотехнологии, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Технологический институт Джорджии, Атланта, США*

Амилоиды – склонные к самосборке белковые агрегаты фибриллярной природы, для которых характерно формирование межмолекулярных кросс-β структур. Амилоиды традиционно связывают с развитием целого ряда заболеваний у человека и животных, называемых амилоидозами. Например, болезни Паркинсона и Альцгеймера, хорея Гентингтона обусловлены амилоидной конверсией некоторых белков в нервной ткани. Кроме того, в последние годы выявлен ряд функциональных амилоидов [1], например, агрегаты мышинового белка СРЕВ3, участвующего в поддержании долговременной памяти, амилоидная форма фибрина, вовлеченного в процесс свертывания крови.

Предполагается, что амилоидов и амилоидогенных белков гораздо больше, чем известно на данный момент. С помощью биоинформатического алгоритма ArchCandy [2] был выявлен амилоидогенный потенциал у ряда транскрипционных факторов человека, вовлеченных при определенных условиях в онкогенез. В данной работе мы проверили амилоидный потенциал исследуемых белков и их амилоидогенных доменов при помощи разработанной в нашей лаборатории дрожжевой тест-системы [3, 4]. Для белков, показавших амилоидогенный потенциал в дрожжах, планируется исследовать амилоидные свойства *in vitro* и в культуре клеток человека (НЕК293Т).

1. Rubel M.S., Fedotov S.A., Grizel A.V., Sopova J.V., Malikova O.A, Chernoff Y.O., Rubel A.A. Functional Mammalian Amyloids and Amyloid-Like Proteins // *Life*. - 2020. - Vol 10, No 9. P. 156.
2. Ahmed A.B., Znassi N., Château M., Kajava A.V. A structure-based approach to predict predisposition to amyloidosis // *Alzheimer's & Dementia*. - 2015. - Vol. 11, No 6. P. 681-690.
3. Chandramowlishwaran P., Sun M., Casey K.L., Romanyuk A.V., Grizel A.V., Sopova J.V., Rubel A.A., Nussbaum-Krammer C., Vorberg I.M., Chernoff Y.O. Mammalian amyloidogenic proteins promote prion nucleation in yeast // *J Biol Chem*. - 2018. - Vol 293, No 9. P. 3436-3450.
4. Chernoff Y.O., Grizel A.V., Rubel A.A., Zelinsky A.A., Chandramowlishwaran P., Chernova T.A. Application of yeast to studying amyloid and prion diseases // *Advances In Genetics*. - 2020. - Vol 105, No 7. P. 308-314.

Роль гена *sws* *Drosophila melanogaster* в функционировании гематоэнцефалического барьера

Е.В. Рябова, П.А. Мелентьев, Н.В. Сурина, С.В. Саранцева.

НИЦ «Курчатowski институт» - ПИЯФ, Россия, Гатчина, Орлова роща

Гематоэнцефалический барьер (ГЭБ) является основной защитной системой мозга любого высшего организма. Нарушение функциональности ГЭБ приводит к серьезным последствиям для работы нервной системы. Как известно, целостную непрерывную структуру ГЭБ обеспечивают межклеточные контакты. Таковыми у позвоночных являются *плотные контакты*, а у беспозвоночных – *септированные контакты*. В последнее время особое внимание уделяется структуре и функциям данного типа межклеточных контактов у плодовой мушки *Drosophila melanogaster* (*D. melanogaster*). Несмотря на то, что этот модельный объект имеет относительно просто устроенную нервную систему, он позволяет изучать структурные особенности ГЭБ, а также ключевые для его функционирования гены, в том числе и ортологи генов млекопитающих. Не менее важным является и анализ проницаемости ГЭБ при транспорте различных веществ в мозг: *D. melanogaster* имеет открытую кровеносную систему, что делает данные исследования технически доступными. Кроме того, дрозофила активно используется для анализа транспорта различных веществ в мозг. В отличие от эндотелиального барьера млекопитающих, ГЭБ *Drosophila melanogaster* состоит из двух типов поверхностной глии (периневральной и субпериневральной) и нейрональной пластинки, окружающих всю площадь нервной системы.

Мутации в гене *swiss cheese* (*sws*) *Drosophila melanogaster*, кодирующем фосфолипазу, вызывают прогрессирующую с возрастом нейродегенерацию в мозге [1]. Показана его роль в субпериневральной и оборачивающей глии. В данной работе мы показали, что нокадаун *sws* в субпериневральной глии приводит к гибели данных клеток и, как следствие, к нарушению гематоэнцефалического и гемато-нервного барьера [2].

Данная работа поддержана грантом РФФИ № 19-34-90151.

1. Kretschmar D. et al. The Swiss Cheese Mutant Causes Glial Hyperwrapping and Brain Degeneration in *Drosophila* // J. Neurosci. 1997. Vol. 17, № 19. P. 7425–7432.
2. Ryabova E.V. et al. Morpho-Functional Consequences of Swiss Cheese Knockdown in Glia of *Drosophila melanogaster*: 3 // Cells. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2021. Vol. 10, № 3. P. 529.

Анализ функционирования строма-ассоциированных промоторов на организменном уровне. Модель *Danio rerio*

П.И. Селина¹, О.А. Савельева², А.И. Куртова³, Е.Е. Воронежская³, В.В. Пleshкан¹, С.В. Костров¹

¹ФГБУ Институт молекулярной генетики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва

²ИТХТ им. М.В. Ломоносова МИРЭА – РТУ, Москва

³ФГБУН Институт биологии развития им. Н.К. Кольцова РАН, Москва

Конструирование векторных систем с оптимальными показателями функционирования является активно развивающейся областью, имеющей важное прикладное значение, в том числе в генетической терапии онкологических заболеваний. Известно, что между компонентами стромы и опухолевыми клетками образуется тесная взаимосвязь, влияющая на прогрессирование заболевания [1-4]. В связи с этим разработка генетических конструкций, содержащих промоторы, ассоциированные с элементами опухолевой стромы, представляется перспективным направлением комплексного терапевтического воздействия на ключевые компоненты опухолевого очага.

Нами проанализирована эффективность функционирования экспрессионных конструкций, содержащих в своем составе ранее охарактеризованные с использованием клеточных культур сильный промотор гена фактора роста соединительной ткани (CTGF) и слабый промотор гена белка активации фибробластов (FAP) человека [5], в организменной модели *Danio rerio* при введении в желток оплодотворенных яйцеклеток до первого деления дробления.

Оценку уровня экспрессии трансгена, находящегося под контролем анализируемых промоторов, проводили с использованием гена люциферазы светлячка *Photinus pyralis*. Показано, что уровень люциферазной активности, обеспечиваемой конструкцией с CTGF промотором, значительно не изменялся в период наблюдения и статистически не отличался от активности, обеспечиваемой контрольным вектором с промотором преданных генов цитомегаловируса человека (CMV). В случае введения плазмиды с промотором FAP наблюдали выраженную динамику накопления активности люциферазы. Люминесцентный сигнал увеличивался в 45 раз за период от 24 до 96 часов после введения векторной ДНК и достигал значений, сопоставимых с уровнями, обеспечиваемыми конструкциями с CTGF и CMV промоторами.

При использовании репортерного гена зеленого флуоресцентного белка наблюдали мозаичное распределение флуоресценции при введении в оплодотворенную яйцеклетку *Danio rerio* анализируемых генетических конструкций. По результатам количественного анализа экспрессирующих маркерный белок эмбриональных клеток не выявлено статистически значимой разницы между данными, полученными при введении векторной ДНК с промоторами CMV и CTGF. Показано, что среди инъецированных эмбрионов вектором, несущем в своем составе промотор FAP, в среднем у 25% рыб наблюдали количество EGFP+ клеток сопоставимое с числом, обеспечиваемым конструкциями с CTGF и CMV промоторами. Иммуногистохимическое маркирование тканей личинки с последующим анализом с использованием конфокальной микроскопии и 3D визуализации на последовательных стадиях развития (10, 24, 48 часов; 4, 5, 9 дней) выявило наличие GFP, ассоциированного с определенными промоторами, в специфических мышечных и эпителиальных клетках. Динамика распределения метки положительно коррелировала с зарегистрированным люциферазным сигналом для каждого из примененных промоторов. Повидимому, обнаруженная динамика накопления люминесцентного сигнала в люциферазной системе, была связана с изменением регуляции экспрессии трансгена, находящегося под контролем промотора белка активации фибробластов.

Полученные данные демонстрируют, что характеристика функционирования генетических конструкций с использованием перевиваемых клеточных культур, может быть не достаточна для оценки перспективности их применения в организменных системах, что необходимо учитывать при разработке векторов для медико-биологических исследований, в том числе в онкотерапии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 19-15-00317.

1. DuFort C.C., Paszek M.J., Weaver V.M. Balancing forces: architectural control of mechanotransduction // Nat Rev Mol Cell Biol. 2011. Vol. 12(5). P. 308-19.
2. Marsh T., Pietras K., McAllister S.S. Fibroblasts as architects of cancer pathogenesis // Biochim Biophys Acta. 2013. Vol. 1832(7). P. 1070-8
3. Nolan D.J., Ciarrocchi A., Mellick A.S., Jaggi J.S., Bambino K., Gupta S., Heikamp E. McDevitt M.R., Scheinberg D.A., Benezra R., Mittal V. Bone marrow-derived endothelial progenitor cells are a major determinant of nascent tumor neovascularization // Genes Dev. 2007. Vol. 21(12). P. 1546-58.
4. Solinas G., Germano G., Mantovani A., Allavena A. Tumor-associated macrophages (TAM) as major players of the cancer-related inflammation // J Leukoc Biol. 2009. Vol. 86(5). P. 1065-73.
5. Antonova D.V., Zinovyeva M.V., Kondratyeva L.G., Sass A.V., Alekseenko I.V., Pleshkan V.V. Possibility for Transcriptional Targeting of Cancer-Associated Fibroblasts-Limitations and Opportunities // Int J Mol Sci. 2021. Vol. 22(7). P. 3298.

Изучение наследственных факторов в развитии нервно-мышечных заболеваний

Е.Э. Слепнёва¹, А.Е. Комиссаров¹, А.Д. Слободина¹, Саранцева С.В¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» ФГБУ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина

Нервно-мышечные заболевания – условно выделяемая группа заболеваний мышечной системы, развивающиеся из-за нарушения структуры и нормального функционирования мышц, поражения периферических нервов или мотонейронов спинного мозга. Многие из заболеваний данной группы характеризуются серьезными нарушениями развития опорно-двигательного аппарата. Наиболее тяжелой формой патологии считаются врожденные контрактуры, которые часто имеют неврогенный характер. Для общего обозначения клинической картины врожденных множественных контрактур, часто используют термин «артрогрипоз». За последнее время были достигнуты значительные успехи в дифференцировании различных типов нервно-мышечных заболеваний и выявлении генов, мутации в которых приводят к развитию данной патологии. Тем не менее наследственные факторы возникновения нервно-мышечных заболеваний полностью не изучены, в данный момент продолжается поиск молекулярных биомаркеров патогенеза для заболеваний данной группы.

В рамках данного исследования была сформирована и клинически охарактеризована коллекция образцов материала (образцы ДНК и биопсийный материал), полученного от больных нервно-мышечными заболеваниями и их ближайших родственников (контрольная группа). Установлен вклад различных форм артрогрипоза в общую группу – врожденный множественный артрогрипоз (ВМА) около 61%; дистальные формы (ДА) около 34%, пациенты с прочими нервно-мышечными заболеваниями около 5%. Внутри группы пациентов с ВМА выделены подгруппы в зависимости от клинического проявления заболевания.

Из литературных данных известно, что мутации в гене эмбрионального миозина *MYH3*, носят патологический характер и приводят к развитию нервно-мышечных заболеваний. Также существуют данные о том, что дифференциальную диагностику, при наличии у пациента врожденных контрактур следует начинать с поиска ранее описанных мутаций в гене *MYH3* (NM_002470.4). Исходя из этого, было проведено секвенирование по Сенгеру участков гена *MYH3* в ходе которого, была обнаружена миссенс мутация с.2015 G>A (p.Arg672His) ассоциированная с развитием синдрома Фримана-Шелдона. Планируется в ходе ДНК-диагностики определить спектр мутаций гена эмбрионального миозина. Полученные данные позволят лучше охарактеризовать гетерогенную группу нервно-мышечных заболеваний и оптимизировать молекулярно-генетическую диагностику данных заболеваний. Мы ожидаем, что наш анализ станет промежуточным звеном в области исследования патологий нервно-мышечных заболеваний и в конечном итоге существующая классификация данных заболеваний будет усовершенствована.

Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Развитие молекулярных и клеточных технологий»

1. Bamshad M., Van Heest A.E., Pleasure D. Arthrogyposis: A review and update // J Bone Joint Surg Am. – 2009. – V.91. – Suppl 4 – P.40-46. doi: 10.2106/JBJS.I.00281
2. Боровиков А.О., Шаркова И.В., Рыжкова О.П. и др. Клинико-генетические характеристики синдрома контрактур конечностей и лица, гипотонии и задержки психомоторного развития (OMIM:616266), обусловленного мутациями в гене NALCN // Нервно-мышечные болезни. – 2019. – V.9. – №1. – P.83–91. doi.org/10.17650/2222-8721-2019-9-1-83-91
3. Габбасова Е.Л., Комиссаров А.Е., Агранович О.Е., и др. Наследственная сенсомоторная полинейропатия // Ортопедия, травматология и восстановительная хирургия детского возраста. – 2020. – Т. 8. – Вып. 3. – С. 333–342. <https://doi.org/10.17816/PTORS21182>

Варианты гена *TNNT3*, ассоциированные с развитием синдрома Шелдона-Холла (дистального артрогрипоза типа 2В)

А.Д. Слободина¹, А.Е. Комиссаров¹, Е.Э. Слепнёва¹, С.В. Саранцева¹

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

Синдром Шелдона–Холла или дистальный артрогрипоз типа 2В (ДА2В) является наиболее распространенным типом ДА, группы заболеваний, характеризующихся врожденными множественными контрактурами суставов. Для пациентов с ДА2В характерны невысокий рост, треугольное лицо, небольшой рот, выраженные носогубные складки и нормальные когнитивные способности, часто встречается камптодактилия и локтевое отклонение [1]. В настоящее время пренатальная ультразвуковая диагностика ДА2В возможна только на поздних сроках беременности, так как в большинстве случаев пороки развития плода не могут быть выявлены до 18-ой недели беременности [2]. ДА2В может быть вызван патогенными вариантами генов *MYH3*, *TNNI2*, *TRPM2* и *TNNT3*. Эпидемиологические данные о распространенности данного типа ДА отсутствуют, но в литературе сообщалось о менее чем 100 случаях [3].

Основная цель работы — поиск патогенных генетических вариантов, приводящих к развитию ДА2В.

Для поиска патогенных генетических вариантов было проведено полноэкзомное секвенирование (ПС) геномной ДНК двух детей с диагнозом ДА2В. С помощью дальнейшей биоинформатической обработки данных у этих пациентов были обнаружены однонуклеотидные замены в гене *TNNT3* (rs121434638 и rs199474721). Оба генетических варианта уже были зарегистрированы ранее в семьях с ДА1 и ДА2В. Далее у пациентов с диагнозом ДА2В было проведено секвенирование по Сэнгеру фрагментов гена *TNNT3*. В каждой семье проводили секвенирование фрагментов ДНК только пробанда. Если был выявлен предполагаемый патогенный генетический вариант, то были протестированы все члены семьи, у которых была доступна ДНК. С помощью такого подхода у еще двух пациентов были обнаружены патогенные варианты гена *TNNT3* в гетерозиготном состоянии (rs121434638 и rs199474721). Обе однонуклеотидные замены приводят к изменению аминокислоты аргинин в положении 63, что подчеркивает ее критическую роль. Эта аминокислота является консервативной и сохраняется во всех известных изоформах белка тропонина Т (ТnТ), что также подтверждает ее значимость. Замена аминокислоты аргинин в положении 63 в быстрой скелетной изоформе ТnТ нарушает взаимодействие ТnТ с тропомиозином, что может привести к развитию контрактур и деформациям конечностей.

В ходе работы были выявлены описанные ранее патогенные варианты гена *TNNT3*, ассоциированные с развитием ДА2В. Исследование демонстрирует важную роль ПС для поиска генетических вариантов, приводящих к развитию ДА2В.

Работа поддержана Благотворительным Фондом имени В.Н. Фомичева.

1. Scala, M., Accogli, A., De Grandis, E., Allegri, A., Bagowski, C.P., Shoukier, M., Maghnie, M. and Capra, V., 2018. A novel pathogenic MYH3 mutation in a child with Sheldon–Hall syndrome and vertebral fusions. *American Journal of Medical Genetics Part A*, 176(3), pp.663-667.
2. Jiang, M., Bian, C., Li, X., Man, X., Ge, W., Han, W., Bao, H., Li, Y., Yi, D., Guan, Y. and Li, J., 2007. Molecular prenatal diagnosis for hereditary distal arthrogryposis type 2B. *Prenatal Diagnosis: Published in Affiliation With the International Society for Prenatal Diagnosis*, 27(5), pp.468-470.
3. Xu, Y., Kang, Q.L. and Zhang, Z.L., 2018. A MYH3 mutation identified for the first time in a Chinese family with Sheldon-Hall syndrome (DA2B). *Neuromuscular Disorders*, 28(5), pp.456-462.

Анализ морфологии и функций глиальных клеток, образующих гематоэнцефалический барьер *Drosophila melanogaster*, при моделировании болезни Альцгеймера

Сурина Н.В., Чайковская Е.В., Саранцева С.В.

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

Болезнь Альцгеймера (БА) является одним из самых распространенных нейродегенеративных заболеваний в мире. Существуют наследственные и спорадические формы заболевания. Наследственные случаи зачастую связаны с мутациями в генах белка предшественника амилоида (APP), а также пресенилинов 1 и 2 [1]. Данные гены кодируют белки, участвующие в протеолизе APP, в результате которого образуются пептиды A β , в частности, A β ₄₂. Многие исследователи придерживаются гипотезы, что именно агрегирование и накопление A β ₄₂ являются триггером для обширных патологических изменений, происходящих во время болезни Альцгеймера. Однако существуют и другие гипотезы, в некоторых из них значительная роль отводится нарушению функционирования гематоэнцефалического барьера (ГЭБ). Существуют исследования, подтверждающие, что A β ₄₂ может проникать в мозг также и из периферической крови проходя ГЭБ, после чего распространятся в мозге по прионному механизму [2].

Сложность нервной системы млекопитающих, а также отсутствие соответствующих моделей не позволяют изучить таргетное влияние факторов БА на эндотелиальные клетки и перициты, которые формируют ГЭБ. Нарушения ГЭБ у млекопитающих наблюдаются на фоне обширной нейродегенерации при моделировании БА [3]. В данном контексте *Drosophila melanogaster* представляет собой удобный модельный объект для изучения ГЭБ: она имеет функциональные аналоги глиальных клеток млекопитающих, а также позволяет включить экспрессию генов интереса в одной или нескольких клеточных популяциях с помощью систем UAS-GAL4 и LexA-LexAop.

В данной работе была проведена оценка морфологии клеток поверхностной глии (периневральной и субпериневральной), а также глии кортекса. Кроме того, был проведен эксперимент по проверке функции гематоэнцефалического барьера. В ходе работы не было выявлено морфологических и функциональных нарушений, образующих ГЭБ клеток поверхностной глии *Drosophila melanogaster*.

1. Bateman R. J. et al. Autosomal-dominant Alzheimer's disease: a review and proposal for the prevention of Alzheimer's disease //Alzheimer's research & therapy. – 2011. – Т. 3. – №. 1. – С. 1.
2. Bu X. L. et al. Blood-derived amyloid- β protein induces Alzheimer's disease pathologies //Molecular psychiatry. – 2018. – Т. 23. – №. 9. – С. 1948-1956.
3. Kumar-Singh S. et al. Dense-core plaques in Tg2576 and PSAPP mouse models of Alzheimer's disease are centered on vessel walls //The American journal of pathology. – 2005. – Т. 167. – №. 2. – С. 527-543.

Антибиотик Аурапланин дестабилизирует А-сайттовую пептидил-тРНК в элонгирующем рибосомном комплексе

О.А. Толичева¹, Д.Д. Чайка², А.А. Грачёв^{1,2}, А.Л. Коневега^{1,2,3}

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

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

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

С появлением резистентных к антибиотикам штаммов патогенов все более актуальными становятся поиск и разработка новых антибактериальных препаратов [1]. Одним из перспективных источников поиска являются малоизученные микроорганизмы. Методом высокопроизводительного скрининга было обнаружено, что культуральная жидкость штамма *Actinoplanes sp. 49252* содержит вещество, ингибирующее рост бактериальных культур путем воздействия на их систему биосинтеза белка. Расшифрованная структура активного соединения, получившего название аурапланин, показала, что данная молекула не принадлежит ни к одному из известных классов антибиотиков [2]. Целью данной работы являлось раскрытие механизма действия аурапланина на элонгационный рибосомный комплекс. Ранее нами было показано, что аурапланин не оказывает существенного влияния на кинетические параметры парциальных реакций цикла элонгации, однако он влияет на вероятность включения неправильной аминоксил-тРНК в растущий полипептид [3]. Используя реконструированную *in vitro* систему синтеза белка из *E.coli*, мы обнаружили, что аурапланин действует на элонгирующий комплекс в некотором смысле противоположно направленно известному антибиотику стрептомицину. Так, аурапланин дестабилизирует А-сайттовую пептидил-тРНК в претранслокационном комплексе, увеличивая значение её K_d , в отличие от стабилизирующего аналогичный комплекс стрептомицина. Тем не менее, аурапланин не влияет на ΔH° реакции диссоциации, то есть не влияет на кодон-антикодонное взаимодействие напрямую. Также, хотя А-сайттовая тРНК и дестабилизирована под действием аурапланина, это не приводит к существенному ускорению реакции транслокации, в то время как стрептомицин данную реакцию замедляет. Таким образом, можно предположить, что ингибирующее влияние аурапланина на синтез белка может быть связано с увеличением уровня ошибочно отклоняемых корректных тРНК из-за их дополнительной дестабилизации в А-сайте.

1. Ventola, C. Lee. "The antibiotic resistance crisis: part 1: causes and threats" P & T: a peer-reviewed journal for formulary management vol. 40,4 (2015): 277-83.
2. Лисевич И.М., Лукьянов Д.А., Остерман И.А., Сергиев П.В., Донцова О.А. Расшифровка механизма действия нового потенциального ингибитора бактериальной трансляции, выделенного из штамма *Actinoplanes sp. 49252* //Материалы XXI Зимней молодежной школы ПИЯФ по биофизике и молекулярной биологии. – 2020. – Том 2 (электронный). Тезисы докладов Молодежной Конференции, состав участников Школы. – С. 142-143.
3. О.А. Толичева, И.М. Лисевич, Д.А. Лукьянов, И.А. Остерман, П.В. Сергиев, О.А. Донцова, А.Л. Коневега. Антибиотик из штамма *Actinoplanes sp. 49252* влияет на реакции цикла элонгации в бактериальной рибосоме //Сборник тезисов VII Всероссийского молодёжного научного форума OPEN SCIENCE 2020. – С. 80.

Изучение влияния мутации гена *Rad51D* на репарацию двуниевых разрывов ДНК.

Торощина А. В.^{1,*}, Ильина Ю. А.¹, Конев А. Ю.^{1,2}

¹ФГБУ Петербургский институт ядерной физики НИЦ “Курчатовский институт”, Гатчина, Россия

²- Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Санкт-Петербург

Своевременная репарация различных повреждений цепей ДНК, накапливающихся в процессе жизни клетки имеет огромное значение для поддержания стабильности генома. Одним из самых опасных типов повреждения ДНК является двуцепочечный разрыв (ДР). Для восстановления таких повреждений в клетке существует несколько репаративных путей: гомологичная рекомбинация, прямое воссоединение концов ДНК, альтернативный путь прямого воссоединения концов с использованием микрогомологии и репарация с помощью отжига одиночной цепи. Существуют гены, мутации в которых приводят к частичной или полной потере способности клетки репарировать двуцепочечные разрывы. Одним из таких генов является ген *Rad51* - центральный ген рекомбинационной репарации у эукариот, продукт которого обладает ДНК-зависимой АТФазной активностью и катализирует обмен нитей между гомологичными молекулами ДНК. В ходе эволюции в геномах эукариотических клеток происходит увеличение числа копий *Rad51*-подобных генов (паралогов): у дрожжей ген *Rad51* имеет два паралога: *Rad55* и *Rad57*, а в геноме млекопитающих число паралогов гена *Rad51* выросло до пяти.

В данной работе мы изучаем роль одного из паралогов *Rad51* - гена *Rad51D* дрозофилы (1) в репарации двуниевых разрывов ДНК, поскольку на сегодняшний день вопрос о молекулярном механизме репарации двуниевых разрывов ДНК в случае нарушений в работе гена *Rad51D* остается открытым. Вместе с тем, в последнее время получены многочисленные данные о прямой вовлеченности рекомбиназ в процессы канцерогенеза. Показано, что с мутациями гена *Rad51D* ассоциирована наиболее агрессивная форма рака молочной железы у женщин (билатеральная форма в молодом возрасте) и рака предстательной железы у мужчин.

Для анализа роли гена *Rad51D* дрозофилы в репарации ДР ДНК использована генетическая система «*DR-white/ I-SceI*», позволяющая вызывать один единственный сайт-специфический разрыв в геноме клетки (2). В ходе эксперимента проводится скрещивание особей, несущих в эухроматиновом участке третьей хромосомы генетическую конструкцию *DR-white*, включающую две встроенные дефектные копии гена *white*, одна из которых имеет сайт узнавания эндонуклеазы *I-SceI*, и особей, несущих источник эндонуклеазы *I-SceI*. Для анализа событий репарации ДНК в клетках зародышевого пути самцов мы проанализировали потомков этого скрещивания, несущих конструкцию *DR-white*, которые фенотипически разделяются на три класса по окраске глаз вследствие использования разных путей репарации разрывов ДНК. Красноглазые особи возникают в результате восстановления функции гена *white* в результате гомологичной рекомбинации. Особи с белыми глазами – в результате прямого воссоединения разорванных концов ДНК (микро- или отсутствие делеций) или отсутствия внесенного разрыва; особи с белыми глазами, не проявляющие красной флюоресценции - в результате отжига одностранных концов с образованием делеции гена *Ds-Red*, расположенного между двумя дефектными копиями гена *white*. Для того, чтобы определить полный спектр репарационных событий в клетках полового зачатка, нами проводится секвенирование фрагментов ДНК гена *white*, в который вносился двуниевый разрыв, у индивидуальных белоглазых потомков второго поколения.

1. Ю. А. Ильина, Украинцев В.Ю., А. Ю. Конев. Исследование мутанта по гену *Rad51D* *Drosophila melanogaster*. Гены и Клетки. 2019, Т.14, № 3.

2. Janssen A. et al. A single double-strand break system reveals repair dynamics and mechanisms in heterochromatin and euchromatin //Genes & development. – 2016. – Т. 30. – №. 14. – С. 1645-1657.

Исследование роли фактора *Chd1* в регуляции транскрипции тканеспецифичных генов в слюнных железах в ходе развития дрозофилы.

Торощина А. В.^{1,*}, Ильина Ю. А.¹, Конев А. Ю.¹

¹ФГБУ Петербургский институт ядерной физики НИЦ “Курчатовский институт”, Гатчина, Россия

CHD1 (*Chromodomain-Helicase DNA-binding 1*) – это консервативный АТФ-зависимый хроматин ремоделирующий фактор. Хроматин ремоделирующие факторы необходимы для реорганизации хроматина в процессах реализации генетической информации.

Геном человека содержит 2 гомолога *CHD*: *CHD1* и *CHD2*, считающихся онкогенами. Как гомозиготные делеции гена *CHD1*, так и сверхпродукция этого белка принимают непосредственное участие в процессах образования онкологических опухолей простаты [2], что делает белок *CHD1* возможной терапевтической мишенью. Геном дрозофилы содержит только один ген *CHD1*, отсутствие которого вызывает нарушение сборки хроматина в мужском пронуклеусе и следствием этого – нежизнеспособность эмбрионов дрозофилы. *CHD1* необходим для включения вариантного гистона H3.3 в ходе репликативно-независимой сборки хроматина [1]. Кроме того, *CHD1* принимает участие в регуляции транскрипции: в политенных хромосомах – он колокализуется с элонгирующей формой РНК-полимеразы II, и необходим при работе РНК полимеразы I [3].

Ранее в нашей лаборатории было показано, что сверх-экспрессия нативной и каталитически неактивной форм белка *CHD1* вызывает деформацию политенных хромосом в слюнных железах дрозофилы. В данной работе мы исследовали влияние сверх-экспрессии *CHD1* в его нативной и доминант-негативной форме и нуль-мутаций гена *Chd1* на транскрипцию генов из районов с измененным при сверх-экспрессии *CHD1* характером пуффирования в политенных хромосомах. В работе будут представлены результаты анализа роли *CHD1* в регуляции транскрипции локализованных в этих районах тканеспецифичных генов слюнных желез в ходе развития дрозофилы.

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 радиационно-индуцированных двунитевых разрывов ДНК в мозге дрозофилы *in vivo* на модели радиационно-чувствительного мутанта Rad201.

В.Ю. Украинцев¹, Ю.А. Ильина¹, А.Ю. Конев^{1,2}

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

² Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Санкт-Петербург

Двунитевой разрыв (ДР) ДНК - наиболее опасное из повреждений генома. В последнее время, повышенный интерес к репарации ДР ДНК обусловлен ее связью с канцерогенезом [1] и необходимостью разработки направленных лекарственных препаратов для терапии онкологических заболеваний. Кроме того, репарация вносимого при редактировании генома двунитевого разрыва ДНК осуществляется клеточными системами, что делает необходимым детальное изучение процесса прохождения репарации и вовлеченных в него факторов для повышения контролируемости и точности редактирования генома. У эукариот высокоточная рекомбинационная репарация двунитевого разрыва осуществляется рекомбиназой Rad51, которой способствуют сходные с Rad51 белки (паралоги Rad51), роль и механизм действия которых все еще слабо изучены. У человека мутации в паралогах RAD51 (RAD51B, RAD51C, RAD51D, XRCC2, XRCC3 и SWSAP1) связаны с возникающими в раннем возрасте агрессивными формами злокачественных опухолей яичников, простаты и молочных желез. Целью наших исследований является изучение функций одного из таких паралогов – Rad51D на модели многоклеточного эукариотического организма – дрозофилы.

Первым этапом восстановления повреждения в ДНК является маркирование повреждения. У эукариот это хроматин-ассоциированное событие. Маркирование ДР ДНК – протяженное фосфорилирование гистона H2AX с образованием γ H2AX (у дрозофилы γ H2Av). К фосфорилированным участкам подходит комплекс MDC1 (mediator of DNA damage checkpoint 1; у дрозофилы - MU2). N-конец MU2 содержит домен, который взаимодействует с MRN комплексом, в то время как домен BRCT взаимодействует с вариантным гистоном H2Av, фосфорилированным по Ser137 (γ H2Av). На завершающем этапе репарации ДР ДНК необходимо устранение всех хроматиновых модификаций и восстановления предшествующей разрыву нуклеосомной плотности.

Для данной работы были использованы линии дрозофилы, в геном которых в качестве прохождения процесса репарации ДР ДНК введена конструкция *MU-2-YFP*. Благодаря связыванию слитого с желтым флуоресцентным белком белка MU2 с фосфорилированным гистоном H2Av после γ -облучения в таких линиях детектируются желтые сигналы фокусов репарации.

Проведен анализ кинетики репарации радиационно-индуцированных повреждений ДНК *in vivo* в клетках изолированного органа многоклеточного организма - дрозофилы. Принимая во внимание радиобиологические данные тестовых экспериментов, была использована доза γ -облучения - 7 Гр. При этой дозе примерно в половине ядер наблюдался хотя бы один фокус репарации. Если количество выявляемых в ядре сигналов больше 3, то завершения репарации в этом ядре за время наблюдения (5-6 часов) не происходит. Проанализировано 304 достоверно законченных репаративных события. Для ядер с одним разрывом среднее время исчезновения одного сигнала MU2-YFP составляет 70 минут в контрольных линиях дикого типа и у ревертанта по мутации радиочувствительности *rad201*. В случае двух разрывов на ядро – 90 минут. Для ядер с тремя разрывами – 240 минут. Данные по мутантной линии *rad201* показывают уменьшение времени репарации: для одного разрыва до 60 мин, для ядер с фокусами репарации оно составляет 80 мин., и 100 мин. для ядер с тремя.

Полученные данные свидетельствуют об уменьшении времени репарации двунитевых разрывов ДНК у радиочувствительного мутанта *rad201* в сравнении с контрольной линией дикого типа. Как мы показали ранее, мутация *rad201* вызвана внедрением ретротранспозона *Opus* в 5' – нетранслируемую часть гена Rad51D дрозофилы. Таким образом, мы обнаружили, что мутация гена Rad51D приводит к ускоренному удалению маркера повреждения ДНК – фосфорилированного гистона H2Av, что является уникальным для изученных в этом отношении мутантов по генам репарации.

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

1. Sullivan M.R., Bernstein K.A. RAD-ical New Insights into RAD51 Regulation Genes 2018; 9(12): 629–52.
2. Janssen A. et al. A single double-strand break system reveals repair dynamics and mechanisms in heterochromatin and euchromatin //Genes & development. – 2016. – Т. 30. – №. 14. – С. 1645-1657.

Комплекс лактоферрина с олеиновой кислотой, лактоферрин, лизоцим и лактальбумин влияют на доступность хроматина в ядрах клеток HeLa для Hoechst 3342

Н.Д. Федорова¹, Д.С. Барабанова², С.Д. Варфоломеева², А.В. Соколов³, В.В. Егоров^{1,4}, Д.В. Лебедев¹

¹ФГБУ ПИЯФ НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

²НИУ ИТМО, Санкт-Петербург

³ФГБНУ ИЭМ, Санкт-Петербург

⁴ФГБУ «НИИ гриппа им. А.А. Смородиной», Санкт-Петербург

Ранее в [1] была показана разница между структурой хроматина ядер клеток после обработки лактоферрином (LF), комплексом лактоферрин-олеиновая кислота (CLOA) и без какой-либо обработки. Изучение такого эффекта представляет интерес в контексте возможной противоопухолевой активности LF и CLOA [2]. Известно, что лактоферрин способен к транспорту в ядро [3] и активации транскрипции гена интерлейкина-1 [4], поэтому он способен связываться с ДНК *in vivo*. Наличие взаимодействия между лактоферрином и ДНК также было показано ранее [5].

В то же время константа связывания лактоферрина с ДНК *in vitro* указывает на сродство к ДНК, которое на порядок больше, чем у гистонов [6]. Это можно объяснить взаимодействием между LF/CLOA и хроматином наряду с различиями в структуре хроматина у нормальных и раковых клеток. Различие в структуре хроматина между нормальными и раковыми клетками было продемонстрировано несколькими методами, включая SANS [7,8,9].

Целью данной работы являлось изучение и характеристика взаимодействия LF и CLOA, а также белков лизоцима и лактальбумина с хроматином изолированных клеточных ядер проточнотометрическим методом.

В исследовании использовалась клеточная линия HeLa. Раствором Версена клетки, находящиеся в монослое, снимали и центрифугировали в течение 5 мин. при 1000 об/мин. Далее клетки ресуспендировали в подкисленном (pH=6) фосфатно-солевом буфере (PBS) и распределяли суспензию по пробиркам (по 1 мл). В каждую пробирку добавляли раствор тритона до конечной концентрации 0,1%, инкубировали 7 мин. После разбавляли PBS до 10 мл и центрифугировали 5 минут. Осадок ресуспендировали в 1 мл PBS и добавляли белки интереса (1 пробирку оставляли в качестве контроля), конечная концентрация белков в эксперименте - 0,5 мг/мл. Инкубировали 30 минут, затем разбавляли PBS до 10 мл и центрифугировали 5 минут. Ресуспендировали осадок в 1 мл PBS и добавляли для фиксации глутаральдегид до 0,5% на 20-30 мин.

После фиксации ядра снова центрифугировали и красили, ресуспендируя в 0,5 мл раствора Hoechst 33342 (концентрация 1 мкг/мл). Измерения проводились на проточном цитофлуориметре Cytotoflex с использованием лазера с длиной волны 405 нм.

При окраске ядер Hoechst 33342 добавление как лактоферрина, так и комплекса лактоферрина с олеиновой кислотой, смещает пик интенсивности флуоресценции влево относительно контрольного образца (т.е., флуоресценция снижается). Кроме того, можно было заметить небольшую разницу между смещёнными пиками. Для более убедительного определения различия между эффектами лактоферрина и лактоферрин-олеинового комплекса было проведено измерение интенсивности флуоресценции смеси этих образцов. На полученных гистограммах чётко видно наличие двух разных пиков. Также было проведено аналогичное измерение для смеси образцов контроля и с комплексом лактоферрин-олеиновая кислота. При добавлении к ядрам лизоцима или лактальбумина наблюдался сдвиг интенсивности флуоресценции вправо относительно контрольного образца в обоих случаях. В качестве образца контроля в эксперименте с лактальбумином использовались ядра HeLa с добавлением альбумина.

Результаты эксперимента показывают, что и лактоферрин, и его комплекс с олеиновой кислотой затрудняют связывание Hoechst 33342 с ДНК, однако вызвано это связыванием белка с ДНК или чем-либо другим - необходимо уточнить посредством дополнительных экспериментов.

В свою очередь, лизоцим и лактальбумин увеличивают доступность ДНК для связывания с Hoechst 33342, для установления природы этого эффекта также требуются дополнительные эксперименты.

1. Lebedev D.V. et al., BBRC, 520, 1, 136-139 (2019)
2. Fang, B., Zhang, M., Tian, M., Jiang, L., Guo, H.Y., Ren, F.Z. Bovine lactoferrin binds oleic acid to form an anti-tumor complex similar to HAMLET. // Biochim Biophys Acta. 2014. 1841(4):535-43
3. Akiyama Y, Oshima K, Shin K, Wakabayashi H, Abe F, Nadano D, Matsuda T. Intracellular retention and subsequent release of bovine milk lactoferrin taken up by human enterocyte-like cell lines, Caco-2, C2BBel1 and HT-29. Biosci Biotechnol Biochem. 2013;77(5):1023-9
4. Penco, S., Pastorino, S., Bianchi-Scarrà, G., & Garrè, C. (1995). Lactoferrin down-modulates the activity of the granulocyte macrophage colony-stimulating factor promoter in interleukin-1 beta-stimulated cells. The Journal of Biological Chemistry, 270(20), 12263-8.
5. Bennet R.M., Davis J., J Lab Clin Med, 127, 1, 127-138 (1982)
6. Furmanski, P., He, J., Ying, L., Bezaul, J., Bhimani, R., & Ho, K. (1997). Functional Significance of the Binding of Lactoferrin to DNA. In Lactoferrin (pp. 313-332). Totowa, NJ: Humana Press.
7. Lebedev D.V. et al., FEBS Letters, 579, 1265-1468 (2005)
8. Bancaud A. et al., Nucleic Acids Res, 40, 8783-8792 (2012)
9. Isaev-Ivanov V.V. et al., Solid State Physics, 52, 996-1005 (2010)

HRAMP системы галобактерий родственны CRISPR-Cas системам III типа

Я.В. Федорова^{1,2}

¹Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, Санкт-Петербург

²Институт Биологии Гена РАН, Москва

Генетические локусы HRAMP (*Halobacterial* RAMP) систем были обнаружены группой Евгения Кунина в 2019 году [1]. Это системы, состоящие из генов, кодирующих Cas7 и Cas5 белки, свойственные CRISPR-Cas системам, а также генов нуклеаз, содержащих HNH и DEDDy домены, и гена, принадлежность которого к какому-либо семейству не удалось выявить биоинформатическими подходами. Несмотря на присутствие Cas генов, образующих эффекторный кор, обеспечивающий связывание направляющих РНК с ДНК/РНК мишенями в CRISPR-Cas системах I класса, системы HRAMP – это solo системы, не соседствующие с CRISPR кассетами.

В связи с этим Кира Макарова и коллеги предположили, что эти системы являются неадаптивными защитными системами архей [1].

Чтобы разобраться в устройстве HRAMP и изучить их механизм работы, мы использовали AlphaFold2 [2] для предсказания структур белков, входящих в состав системы. Предсказанные модели были проанализированы с помощью сервера Dali, позволяющего искать структурные сходства.

Результаты работ показали, что коровый ген HRAMP систем родственен Cas10 белкам, относящимся к CRISPR-Cas системам III типа. Можно предположить, что этот белок потерял функции производства сигнальных молекул циклических олигоаденилатов, но сохранил нуклеазные функции Cas10. Кроме того результаты работ показали, что ряд белков является регуляторами транскрипции и, судя по всему, могут репрессировать экспрессию HRAMP генов в ответ на присутствие каких-либо сигнальных молекул в клетке.

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-3793.2021.1.4

1. Kira S Makarova, Svetlana Karamycheva, Shiraz A Shah, Gisle Vestergaard, Roger A Garrett, Eugene V Koonin, Predicted highly derived class 1 CRISPR-Cas system in Haloarchaea containing diverged Cas5 and Cas7 homologs but no CRISPR array, *FEMS Microbiology Letters*, Volume 366, Issue 7, April 2019, fnz079
2. Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A. *et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596, 583–589, 2021.

Гидрозоли детонационного синтеза (ДНА) и их биомедицинские применения

Д.С. Черечукин¹, Ю.В. Кульвелис², В.Т. Лебедев², Н.П.Евlampиева¹, А.Я.Вуль³

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

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

³Физико-технический институт им. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

Наноалмазы детонационного синтеза (ДНА) в настоящее время стали коммерчески доступными материалами, что способствует их применениям в различных научно-технических направлениях, включая биомедицину. Прогресс технологий синтеза и выделения алмазов, позволяет получать ДНА калиброванного размера с поверхностью, функционализированной нужными химическими группами. В зависимости от способа обработки поверхности, заряд частиц ДНА диаметром в несколько нанометров можно варьировать по знаку и величине в водных средах. ДНА образуют стабильные гидрозоли в водных средах с размером агрегатов 30-40 нм.

Благодаря комплексу физико-химических свойств (химическая инертность, отсутствие токсичности, способность к люминесценции, устойчивость к ионизирующим излучениям) ДНА применяют в качестве носителей лекарственных препаратов и биомаркеров в медицинской диагностике [1].

Как показали наши исследования спектральных свойств ДНА и их комплексов [2], алмазы могут служить активными платформами для молекул фотосенсибилизаторов (ФС), применяемых в фотодинамической терапии - неинвазивном методе, эффективном в лечении онкологических и некоторых кожных заболеваний.

В работе использованы ДНА в виде гидрозолей с весовой концентрацией наночастиц 0.64%, полученные в Иоффе институте по технологии [3] на основе исходного алмазного сырья (Бюро специального дизайна и технологий «Технолог», Санкт-Петербург, Россия). Кристаллы ДНА имели размеры 4-5 нм (~8000 атомов углерода), положительный, либо отрицательный ζ -потенциал (30-50 мВ) в водной среде в зависимости от привитых групп (Н, ОН, СООН).

В дополнение к люминесцентной спектроскопии для изучения гидрозолей применяли динамическое рассеяние света и гидродинамические методы для контроля размеров частиц и их агрегатов.

Показано, что в водной среде при возбуждении ультрафиолетовым излучением положительно или отрицательно заряженные ДНА люминесцируют с максимумом эмиссии в красной области спектра (650 нм). Это свойство алмазов было важным при создании люминесцентных тройных комплексов ДНА с биосовместимым полимером поливинилпирролидоном (ПВП, $M_n=10^4$) и Радахлорином® (ФС второго поколения на основе хлорина е6), применяемым в фотодинамической терапии.

По данным оптического поглощения и люминесценции тройных комплексов в изотоническом растворителе, хлорин е6 в их составе в условиях УФ возбуждения дает спектр люминесценции с максимумом на длине волны 665 нм. Возбуждение ФС в этой области способствует генерации синглетного кислорода в тканях, роль которого первостепенна в фотодинамической терапии.

Установлено, что в тройных комплексах е6-ПВП-ДНА полимер вызывает дезагрегацию молекул е6 и ДНА и стимулирует люминесценцию этих компонент. При этом ДНА предохраняет ФС от быстрого выгорания. Таким образом, полимерная и алмазная компоненты способствуют повышению эффективности ФС.

В перспективе применение разработанных тройных комплексов позволит уменьшить терапевтическую дозу ФС(е6), снизив токсичность соответствующих препаратов, и улучшить их функциональные свойства.

* Спектрально-люминесцентные исследования были проведены в Ресурсном центре СПбГУ «Оптические и лазерные методы исследования вещества»

Работа поддержана РФФИ, грант 18-29-19008 Металлоуглеродные наноструктурированные материалы для биомедицины».

1. Chen M., Pierstorff E., Lam R., Li Sh.-Y., Huang H., Osawa E., Ho D. Nanodiamond- Mediated Delivery of Water-Insoluble Therapeutics // ACSNano. 2009, 3, 2016-2022.
2. Kulvelis Yu., Lebedev V., Yevlampieva N., Cherechukin D. Yudina E. Enhancement of Singlet Oxygen Generation of Radachlorin® Conjugated with Polyvinylpyrrolidone and Nanodiamonds in Aqueous Media in "Green Photocatalytic Semiconductors", Springer, 2021. VulA.Ya., Eidelman
3. E.D., Aleksenskiy A.E., Shvidchenko A.V., Dideikin A.T., Yuferev V.S., Lebedev V.T., Kulvelis Yu.V, Avdeev M.V. "Transition sol-gel in nanodiamondhydrosols", Carbon. , 2017, vol. 114, pp. 242-249.

Формирование кристаллического комплекса Dps-ДНК при различных условиях по данным крио-ЭМ и МУРР

Ю.М. Чесноков^{1,2}, Р.А. Камышинский^{1,2}, Л.А. Дадинова², А.А. Можжаев^{2,3}, А.Л. Васильев^{1,2},
Э.В. Штыкова²

¹НИИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия

³ИБХ РАН, г. Москва, Россия

Эффект формирования сокристаллов Dps-ДНК, возникающий в *Escherichia coli* в ответ на стрессовые условия внешней среды для защиты бактериального генома, хорошо описан в литературе [1]. Однако многие детали формирования сокристаллов остаются в значительной мере неизвестными. В данной работе мы объединяем результаты *in vitro* исследований кристаллического комплекса Dps-ДНК, полученные за последние несколько лет нашей группой комплементарными методами: крио-электронной микроскопией (крио-ЭМ) и малоугловым рентгеновским рассеянием (МУРР).

Образцы для крио-ЭМ были витрифицированы с помощью Vitrobot Mark IV и исследованы с помощью микроскопа Titan Krios (ThermoFisher Scientific, США), оснащенного прямым детектором электронов Falcon2, корректором аберраций (CEOS, Германия) и фазовой пластиной Volta. Данные для анализа одиночных частиц и крио-электронной томографии (крио-ЭТ) были получены в режиме низких доз при ускоряющем напряжении 300 кВ. Для анализа одиночных частиц использовались программы Warp и Relion, а для обработки крио-ЭТ данных использовались программные пакеты IMOD, EMAN2 и Relion. Эксперименты МУРР проводились на станции P12 BioSAXS синхротрона PETRAIII (DESY, Гамбург, Германия).

Комплексный структурный анализ показал формирование 50-300 нм сокристаллов Dps-ДНК с двумя различными типами упаковок [2, 3], которые соответствуют триклинной и кубической кристаллической решетке. Были определены параметры буфера, при которых формируются сокристаллы только с одной или несколькими типами упаковки. Методом субтомографического усреднения были получены трехмерные реконструкции элементарных ячеек сокристаллов с разрешением около 13 ангстрем, что позволило напрямую визуализировать ДНК и додекамеры Dps.

Было исследовано влияние MgCl₂, FeSO₄ на комплекс Dps-ДНК и отдельно на структуру белка Dps [4]. Обнаружено, что добавление дивалентных ионов Fe²⁺ и Mg²⁺ может приводить к распаду сокристаллов Dps-ДНК, однако процесс полностью или частично обратим при добавлении этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА). Показано, что наличие ионов Fe²⁺ приводит к формированию в полости додекамера Dps Fe-содержащего наноразмерного кластера. Анализ одиночных частиц позволил получить трехмерную реконструкцию додекамера Dps с Fe-содержащим кластером с разрешением 3.2 ангстрема. Показано, что такие кластеры начинают формироваться около гидрофобных пор Dps.

Помимо этого, изучено влияние температуры и времени выдержки смеси Dps-ДНК на морфологию и структуру сокристаллов. Данные крио-ЭМ позволили визуализировать образование индивидуальных комплексов Dps с короткими линейными фрагментами ДНК и взаимодействие Dps-Dps.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 18-74-10071).

1. DNA protection by stress-induced biocrystallization / S. G. Wolf, D. Frenkiel, T. Arad, S. E. Finkel, R. Kolter, A. Minsky // Nature. 1999. № 400. С. 83-85.
2. Protective Dps-DNA co-crystallization in stressed cells: an *in vitro* structural study by small-angle X-ray scattering and cryo-electron tomography / L. A. Dadinova, Y. M. Chesnokov, R. A. Kamyshinsky, I. A. Orlov, M. V. Petoukhov, A. A. Mozhaev, E. Y. Soshinskaya, V. N. Lazarev, V. A. Manuvera, A. S. Orekhov, A. L. Vasiliev, E. V. Shtykova // FEBS letters. 2019. № 593. С. 1360-1371.
3. Polymorphic Protective Dps-DNA Co-Crystals by Cryo Electron Tomography and Small Angle X-Ray Scattering / R. A. Kamyshinsky, Y. M. Chesnokov, L. A. Dadinova, A. A. Mozhaev, I. A. Orlov, M. V. Petoukhov, A. S. Orekhov, E. V. Shtykova, A. L. Vasiliev // Biomolecules. 2020. № 10. С. 39.
4. Structural Rearrangement of Dps-DNA Complex Caused by Divalent Mg and Fe Cations / L. A. Dadinova, R. A. Kamyshinsky, Y. M. Chesnokov, A. A. Mozhaev, V. Matveev, A. Gruzinov, A. L. Vasiliev, E. V. Shtykova // International Journal of Molecular Sciences. 2021. № 22. С. 6056.

Ассоциированный с тубулиновыми микротрубочками плюс-концевой белок EB3 регулирует локализацию кальмодулин-зависимой протеинкиназы II в гиппокампальных нейронах

М.Е. Чигряй¹, Е.И. Пчицкая¹, И.Б. Безпрозванный^{1,2}

¹*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Лаборатория молекулярной нейродегенерации, Санкт-Петербург, Россия*

²*Юго-Западный медицинский центр университет Техаса, Даллас, штат Техас, США*

Микротрубочки (МТ) — полярные тубулиновые биополимеры, участвующие в формировании цитоскелета в аксонах и дендритах нейрона. Недавние исследования показали, что микротрубочки, в зависимости от нейрональной активности, временно входят в дендритные шипики, вызывая увеличение размера его головки [1,3]. Кальмодулин-зависимая протеинкиназа второго типа (СаМКII) представляет собой фермент, участвующий в регуляции процессов обучения и памяти, а также во многих сигнальных каскадах. Активация синапсов запускает транслокацию СаМКII из дендритов к дендритным шипикам, где она индуцирует последующие функциональные и морфологические изменения [4]. Ранее исследования о влиянии EB3 на локализацию СаМКII не проводились, однако было известно, что вход динамических микротрубочек увеличивает содержание белка постсинаптической плотности PSD-95 в дендритных шипиках [2]. Гиперэкспрессия EB3 приводит к значительному увеличению процента дендритных шипиков грибовидного типа у первичных гиппокампальных нейронов, обладающих большой головкой и формирующих сильную синаптическую связь, а также предотвращает снижение их числа в нейронах, полученных из мышей-моделей болезни Альцгеймера линии PS1-M146V [5]. Для исследования локализации СаМКII первичные гиппокампальные нейроны ко-трансфецировались плазмидой mCherry и Venus-СаМКII alpha. Условия низкой амилоидной токсичности моделировались путем добавления олигомерной фракции пептидов Ab42 на 14 день культивирования *in vitro* и инкубации в течение 72 часов. Гиперэкспрессия EB3 достигалась путем заражения данной группы лентивирусом, индуцирующим экспрессию EB3 в нейроне. Были получены конфокальные изображения нейронов контрольной группы и гиперэкспрессирующих EB3 в нормальных условиях и в условиях амилоидной токсичности. Для сравнения экспрессии СаМКII в шипиках и дендритах с помощью программы ImageJ была измерена усредненная яркость СаМКII и Cherry в сегменте, соответствующем головке исследуемого шипика, и в сегменте той же площади в соседнем дендрите. Усредненная яркость СаМКII нормировалась на яркость Cherry в том же сегменте, после чего вычислялось соотношение нормированной интенсивности флуоресценции СаМКII между головкой шипика и соседним участком дендрита. Результаты показали, что гиперэкспрессия EB3 стимулирует локализацию СаМКII в дендритных шипиках гиппокампальных нейронов по сравнению с дендритами и предотвращает снижение экспрессии данного белка в дендритных шипиках в условиях низкой амилоидной токсичности. Таким образом, полученные результаты указывают на важность EB3 в функционировании синапсов и потенциальный нейропротекторный эффект данного белка.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-15-00184.

1. Gu J., Firestein B.L., Zheng J.Q. Microtubules in dendritic spine development // *Journal of Neuroscience*. 2008. № 46 (28). С. 12120–12124.
2. Hu Xindao [и др.]. BDNF-Induced Increase of PSD-95 in Dendritic Spines Requires Dynamic Microtubule Invasions // *Journal of Neuroscience*. 2011. № 31 (43). С. 15597-15603.
3. Jaworski J. [и др.]. Dynamic Microtubules Regulate Dendritic Spine Morphology and Synaptic Plasticity // *Neuron*. 2009. № 1 (61). С. 85–100.
4. Lemieux M. [и др.]. Translocation of СаМКII to dendritic microtubules supports the plasticity of local synapses // *Cell Biol*. 2012. № 198 (6). С. 1055–1073.
5. Ekaterina Pchitskaya, Nina Kraskovskaya, Daria Chernyuk, Elena Popugaeva, Hua Zhang, Olga Vlasova & Ilya Bezprozvanny. Stim2-Eb3 Association and Morphology of Dendritic Spines in Hippocampal Neurons // *Scientific Reports*. 2017. № 7. С. 17625

Анализ влияния неспецифического взаимодействия направляющей РНК и РНК-субстрата на активность РНК-управляемой нуклеазы PguCas13b.

А.В. Чиринская¹, М. А. Мисюрина¹, А.С. Фотина¹, П.Ш. Устабаев¹, Ю.В. Сопова^{1,2}, Е.И. Леонова^{1,3}

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

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

³НТУ «Сириус», Сочи

Системы CRISPR/Cas приобретают все большую популярность в качестве инструментов манипулирования геномной ДНК, в частности, на их основе разрабатывают подходы к лечению генетических заболеваний человека. На данный момент известно по меньшей мере 3 семейства Cas-нуклеаз среди CRISPR/Cas систем с единственным эффекторным белком: Cas9, Cas12 и Cas13.

Cas13 – семейство РНК-специфичных нуклеаз, в котором на данный момент насчитывается по меньшей мере 4 фермента: Cas13a, Cas13b, Cas13c (ранее названные C2c2, C2c6 и C2c7 соответственно) [1–3] и Cas13d[4]. Нуклеазы данного семейства имеют ряд сходств и различий с другими семействами Cas нуклеаз. Аналогично ферментам семейств Cas9 и Cas12 для активации нуклеазной активности требуется взаимодействие с дополнительными РНК молекулами: направляющими РНК [2]. Связывание нуклеаз семейства Cas13 с РНК-мишенью считается крайне специфичным, показано, что наличие тандемных (2 пары нуклеотидов) неспаренностей между направляющей РНК и целевой последовательностью ведет к отсутствию нуклеазной реакции[5,6]. Помимо специфичной рибонуклеазной активности как минимум для Cas13a было показано [5] наличие коллатерального эффекта – после внесения специфичного разрыва в РНК-мишень, близлежащие молекулы РНК подвергаются неспецифичной рибонуклеазной активности, приводящей к их разрушению. Выдвигается гипотеза, что данный эффект мог быть использован бактериями в случае программируемой клеточной смерти, в частности, для защиты от распространения вирусных бактериофагов в бактериальных колониях[7]. Коллатеральный эффект был использован в качестве основы нового метода детекции определенных молекул РНК, в частности, РНК-содержащих вирусов, в образцах – SHERLOCK[7]. Также нуклеазы Cas13 используют для редактирования транскриптома организмов и создания нокаутов [1,2,4]. Помимо этого, модификация фермента Cas13 позволила использовать его для редактирования отдельных нуклеотидов без осуществления нуклеазной реакции (системы REPAIR и RESCUE)[8].

Сейчас активно ведутся исследования по поиску новых и модификации существующих белков семейства Cas13. Мы успешно наработали в бактериях и выделили еще не исследованную рекомбинантную нуклеазу PguCas13b и исследовали ее активность *in vitro* при наличии метки SUMO и после ее протеолитического отщепления и показали, что белок в сумоилированной форме обладает большей активностью. Также мы получили белок PguCas13b, несущий мутацию в домене, ответственном за взаимодействие с направляющей РНК. Мы провели проверку специфичности сумоилированной формы белка PguCas13b *in vitro* и показали, что даже однонуклеотидные замены в определенных положениях способны резко снизить активность Cas-нуклеазы. Полученные результаты свидетельствуют о крайней специфичности белка SUMO-PguCas13b и открывают широкие возможности для разработки высокоточных диагностических систем и систем визуализации экспрессии генов.

Работа выполнена при поддержке грантов СПбГУ ID 73023210 и СПбГУ ID 73023210.

1. Abudayyeh O.O. et al. RNA targeting with CRISPR-Cas13 // Nature. Nature Publishing Group, 2017. Vol. 550, № 7675. P. 280–284.
2. Cox D.B.T. et al. RNA editing with CRISPR-Cas13 // Science (80-). American Association for the Advancement of Science, 2017. Vol. 358, № 6366. P. 1019–1027.
3. Shmakov S. et al. Diversity and evolution of class 2 CRISPR-Cas systems // Nat. Rev. Microbiol. Nature Publishing Group, 2017. Vol. 15, № 3. P. 169–182.
4. Konermann S. et al. Transcriptome Engineering with RNA-Targeting Type VI-D CRISPR Effectors // Cell. Cell Press, 2018. Vol. 173, № 3. P. 665-676.e14.
5. Abudayyeh O.O. et al. C2c2 is a single-component programmable RNA-guided RNA-targeting CRISPR effector // Science (80-). American Association for the Advancement of Science, 2016. Vol. 353, № 6299.
6. Slaymaker I.M. et al. High-Resolution Structure of Cas13b and Biochemical Characterization of RNA Targeting and Cleavage // Cell Rep. Elsevier B.V., 2019. Vol. 26, № 13. P. 3741-3751.
7. Gootenberg J.S. et al. Nucleic acid detection with CRISPR-Cas13a/C2c2 // Science (80-). American Association for the Advancement of Science, 2017. Vol. 356, № 6336. P. 438–442.
8. Abudayyeh O.O. et al. A cytosine deaminase for programmable single-base RNA editing // Science (80-). American Association for the Advancement of Science, 2019. Vol. 365, № 6451. P. 382-386.

Влияние вариативности последовательности Шайна-Дальгарно мРНК на эффективность трансляции

Д.С. Виноградова^{1,2}, Л.О. Шамардина^{1,3}, П.С. Касацкий¹, Е.В. Полесскова^{1,3}, А.Л. Коневега^{1,3,4}

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

² *Нанотемпер Технолоджис Рус, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия*

Трансляция является завершающим этапом экспрессии генов, во время которого кодирующая полинуклеотидная цепь матричной РНК (мРНК) переводится в аминокислотную последовательность белка. Данный процесс включает в себя четыре основные стадии: инициацию, элонгацию, терминацию и высвобождение рибосом [1]. В 5'-нетранслируемой области мРНК находится последовательность Шайна-Дальгарно (ШД), комплементарная участку последовательности на 3'-конце 16S рибосомальной РНК, называемому последовательностью антиШД. Основную свою роль данный мотив выполняет на первой, наиболее длительной и энергозатратной из всех стадий трансляции – инициации [2]. На этом этапе происходит сборка белоксинтезирующей системы из отдельных макромолекул с определением рамки считывания, то есть происходит ориентация малой субъединицы рибосомы относительно мРНК, определение стартового кодона, а также связывание инициаторной формилметионин-тРНК (fMet-tRNA^{fMet}). Данный процесс осуществляют и координируют инициаторные факторы (IF1, IF2, IF3). До сих пор существует мнение, что последовательность ШД не является необходимым условием начала синтеза белка. В пользу этого говорит существование безлидерных мРНК (с отсутствующей или очень небольшой 5'- нетранслируемой областью), а также реинициация на полицистронных мРНК. Актуальным остается вопрос о влиянии последовательности ШД на эффективность пептидилтрансферазной реакции и транслокации, а также о времени диссоциации ШД:антиШД комплекса [3].

При оценке влияния особенностей последовательности ШД на эффективность трансляции мы использовали конструкторы мРНК с различной длиной последовательности ШД и расстоянием от этой последовательности до стартового кодона (m0, m2/7, m4/7, m8/7, m6/9 (контрольная), m4/16, где первое значение – длина последовательности, второе – расстояние от первого нуклеотида стартового кодона АУГ до среднего гуанозина последовательности ШД: aagГагг [4]). Конструкторы мРНК, m8/7 и m6/9, проявляли наибольшую эффективность в образовании инициаторного комплекса. Аналогичная зависимость сохранялась и для образования первой пептидной связи, где наибольший синтез дипептида fMet[14C]Lys наблюдался для комплексов, образованных с m8/7 и m6/9. Отсутствие последовательности ШД (m0) или ее удаление от инициаторного кодона (m4/16) значительно снижали эффективность образования инициаторного комплекса, а также количество синтезированного дипептида.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 17-14-01416.

1. Marina V. Rodnina. Translation in Prokaryotes // Cold Spring Harbor Perspectives in Biology. - Germany. - 2018. - №4
2. Laursen B., Sorensen H., Mortensen K., Sperling-Petersen H. Initiation of Protein Synthesis in Bacteria // Microbiology and molecular biology reviews. - 2005. - Vol. 69. - № 1. - P. 101-123
3. Gualerzi C., Pon C. Initiation of mRNA translation in bacteria: structural and dynamic aspects // Cell. – 2015. – vol. 72. – p. 4341–4367
4. Osterman I., Evfratov S., Sergiev P., Dontsova O. Comparison of mRNA features affecting translation initiation and reinitiation // Lomonosov Moscow State University. - M: Nucleic Acids Research. - 2013. - Vol. 41. - № 1. - P. 474-486

Влияние мутации гена *Rad51D* на чувствительность к ММС и цисплатине у дрозофилы

А. Д. Шевляков^{1,2}, Ю. А. Ильина¹, А. Ю. Конев^{1,3}

1- НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

2 – ФГБОУВО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)»

3- КГЦ-ПИЯФ

Для поддержания жизни и деления клеток необходимым и обязательным условием является стабильность генома. Одним из компонентов генома эукариотических клеток является молекула ДНК, которая подвержена повреждающему воздействию как внутренних (ошибки при репликации, рекомбинации и репарации и перемещение мобильных элементов), так и внешних физических и химических факторов. В процессе эволюции про- и эукариоты выработали механизм исправления (репарации) повреждений ДНК. Наиболее опасным повреждением ДНК является двуниевой разрыв (ДР). На сегодняшний день выделяют два основных механизма репарации ДР ДНК: прямое воссоединение разорванных концов и восстановление нуклеотидной последовательности по механизму гомологичной рекомбинации.

Ген *Rad51D* относится к семейству *Rad51*-подобных белков и является паралогом центрального гена рекомбинационной репарации эукариот – гена *Rad51*, который обладает ДНК-зависимой АТФазной активностью и катализирует обмен нитей между гомологичными молекулами ДНК. В ходе эволюционного развития эукариотических организмов происходило увеличение числа паралогов гена *Rad51*: у дрожжей определены – *Rad51*, *Rad55*, *Rad57* и мейоз-специфичный *DMC1*; у дрозофилы – *Spn-A (hRad51)*, *Spn-B (hXRCC3)*, *Spn-D (hRad51C)*, *Rad51D* и *XRCC2*; у человека определено уже 7 паралогов: *Rad51*, *Rad51B*, *Rad51C*, *Rad51D*, *XRCC2*, *XRCC3* и мейоз-специфичный *DMC1*. Паралоги *Rad51* участвуют в сборке *Rad51*-филамента, его стабилизации и удлинении, а также вовлечены в поиск гомологии, но их функции у высших организмов остаются во многом не ясными. В последние годы показано их особое значение в канцерогенезе. Так, мутации *Rad51D* связаны с возникающими в раннем возрасте агрессивными формами злокачественных опухолей яичников, простаты и молочных желез [1].

Ранее из природной популяции был выделен радиочувствительный мутант дрозофилы *rad(2)201G1*. Это был первый полученный радиочувствительный мутант высших эукариотических организмов [2]. Молекулярный анализ показал, что мутант *rad(2)201G1* содержит инсерцию транспозона *Opus* в 5'-нетранслируемый участок гена *Rad51D* и нуклеотидные замены [3] и было установлено, что инсерция *Opus* блокирует экспрессию гена *Rad51D* [4].

В данной работе для определения вовлеченности гена *Rad51D* в репарацию ДНК в качестве генотоксичных химических факторов были выбраны метилметансульфонат (ММС) и *cis*-диаминодихлороплатина (цисплатин). ММС метилирует аденин и гуанин в ДНК, что приводит к остановке репликационной вилки. Также известно, что ММС метилирует некоторые белки, что влечет нарушение их структуры и протеолиз [5]. Цисплатин – цитостатический препарат при лечении различных злокачественных новообразований. Механизм его действия основан на образовании ковалентных поперечных связей между основаниями ДНК, 65% из которых приходится на связь «гуанин-гуанин» [6]. Вырезание подобных аддуктов приводит к образованию ДР ДНК.

Обработка ММС и цисплатином проводилась на 3 личиночной стадии развития дрозофилы, путем добавления веществ в питательную среду. Культура были синхронизированы использованием временных интервалов: 24-часовая кладки и обработка мутагенами через 72 часа. Чувствительность к ДНК-повреждающим агентам определяли, анализируя выживаемости на куколочной стадии развития.

Результаты работы показывают, что использование ММС в концентрациях до 0,2% не приводит к значимым отличиям выживаемости мутанта от дикого типа. При концентрации от 0,3% ММС мы наблюдаем тенденцию снижения выживаемости у мутанта. В начальной дозировке 0,05мМ цисплатин не оказал значимого влияния на выживаемость в мутантной линии. Но увеличение дозировки цисплатина до 0,2мМ привело к почти двукратному снижению выживаемости у мутанта. Работа будет продолжена с более высокими концентрациями ММС и цисплатином.

На сегодняшний день мы можем утверждать, что мутация в гене *Rad51D* вызывает нарушение жизнеспособности организмов после воздействия на них цисплатином, что указывает на вовлеченность гена *Rad51D* в репарацию ДР ДНК у дрозофилы.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Функциональная и структурная организация сложных мультикомпонентных биологических систем их динамика” (рег.№121060200127-6).

1. Castera L., Harter V., Muller E., et al. Landscape of pathogenic variations in a panel of 34 genes and cancer risk estimation from 5131 HBOC families// Genet. Med. 2018. V/ 20(12). P. 1677-1686.
2. Хромых Ю.М., Варенцова Е.Р., Захаров И.А. Сверхчувствительные к ионизирующей радиации мутанты дрозофилы. // Докл. АН СССР. 1977. Т.234. С.199-203.
3. Хромых Ю. М., Варенцова Е. Р., Саранцева С. В., Котлованова Л. В. Эпигенетический эффект мутации *gad201(G1)* в системе активации Р-элементов у дрозофилы// Генетика. 2008. Т. 44. № 3.С. 346–352.
4. A. Konev, Y. Ilina. Genetic analysis of the *Rad51D* gene// Материалы международной конференции TAGC2020 Online. США, Вашингтон. P. 219.
5. Burgis N. E., Samson L.D. The protein degradation response of *Saccharomyces cerevisiae* to classical DNA-damaging agents// Chem.Res. Toxicol 2007. V.20. P. 1843-1853.
6. Eastman A. The formation, isolation and characterization of DNA adducts produce by anticancer platinum complex// Pharmacol. Ther. 1987. V. 34. P. 155-166.

Создание препрегов для 3D-печати на основе непрерывного углеродного волокна с использованием полиимидов в качестве высокотемпературного связующего

Д.С. Александрова^{1,2}, М.В. Богдановская^{1,2}, А.С. Егоров^{1,2}, Я.С. Выгодский³

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, Москва

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва,

³ ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

Композитные материалы, армированные непрерывными волокна известны уже больше полувека и, благодаря сочетанию прочности и легкости [1], активно используются в высокотехнологичных отраслях, таких как авиационная и космическая промышленность, машиностроение, энергетика и др. Тем не менее изготовление изделий из непрерывного волокна сопряжено с рядом проблем, такими как формование изделия (обычно при помощи формы или каркаса), равномерная пропитка волокна раствором/расплавом полимера, отверждение связующего и т.п. Все эти сложности приводят к тому, что изделия, армированные волокном ограничены в геометрии и размерах, в то время как их изготовление достаточно дорогой и времязатратный процесс.

Использование 3D-печати методом послойного наплавления может не только ускорить и автоматизировать изготовление армированных изделий, но и позволит получать детали с более сложной геометрией, чем при использовании классических технологий. На текущий момент на рынке представлено большое количество 3D-принтеров, адаптированных под печать непрерывным волокном. Для работы таких устройств, обычно, используется предварительно пропитанное термопластичным связующим волокно – препрег. В связи с тем, что в данное время коммерчески доступными являются только препреги, совместимые с низкотемпературными связующими, цель данной работы заключается в разработке новых препрегов из углеродного волокна на основе высокотемпературных связующих.

Ранее [2] нами было изучено влияние олигомерных аппретирующих композиций имидного строения на качество пропитки углеродного волокна высокотемпературными термопластами на примере коммерчески доступного полиэфиримида (ПЭИ) Ultem-1000, а также рассмотрено [3] влияние введения различных добавок на реологию растворов полиамидокислот, для применения их в качестве пропиточного раствора при получении препрегов с высокими рабочими температурами.

В продолжение работ нами были синтезированы и опробованы ряд аппретирующих составов олигомерной и полимерной природы. Для каждого состава была подобрана оптимальная концентрация рабочего раствора и температура высушивания. Изучена совместимость предложенных аппретов с высокотемпературными пластиками на примере пропитки аппретированного волокна раствором Ultem-1000. Получены образцы препрегов на основе волокна с различными аппретами, методом сканирующей электронной микроскопии исследована равномерность пропитки волокна раствором ПЭИ.

В ходе работ также был синтезирован ряд полиимидных матриц различного состава, потенциально пригодных для пропитки волокна, а также для использования в качестве термопластичного связующего совместно с препрегом или без него. Методом термогравиметрии для всех синтезированных матриц была определена термостойкость. Также для синтезированных полимеров с использованием метода Оуэнса-Вендта-Кабля была рассчитана удельная свободная поверхностная энергия. Полученные данные позволили выбрать наиболее перспективные матрицы для проведения дальнейших испытаний.

Выбранные в ходе исследования аппретирующая композиция и полимерные матрицы были использованы для изготовления образцов препрегов для проведения печати тестового изделия на 3D-принтере методом послойного наплавления. В дальнейшем планируется тестирование синтезированных полимерных матриц для вытяжки филамента.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках Договора № 18-29-18087\20 о предоставлении гранта победителю конкурса и реализации научного проекта. Работа выполнена с использованием научного оборудования ЦКП НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА.

1. Goh G.D., Dikshit V., Nagalingam A.P., Goh G.L., Agarwala S., Sing S.L., Wei J., Yeong W.Y. Characterization of mechanical properties and fracture mode of additively manufactured carbon fiber and glass fiber reinforced thermoplastics // Mater. Des. 2018, V. 137, P. 79
2. Storozhuk I.P., N.G. Pavlukovich, A.S. Egorov Development of imid-containing appretes for carbon fibers and carbon fabrics // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2020, V. 934 P. 012039
3. 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

Электроискровые покрытия Fe-Co-Cr-Ni-(Cu) для защиты стали от трибокоррозионного износа и биологического обрастания в морской воде

М.Н. Антонюк, К.А. Купцов, А.Н. Шейко, Д.В. Штанский

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

Важнейшей проблемой, с которой сталкивается промышленная инфраструктура в прибрежной зоне, является разрушение строительных конструкций, механизмов и оборудования вследствие агрессивных химических, атмосферных и температурных воздействий. Материалы, работающие в агрессивных условиях (при контакте с соленой или грунтовой водой, а также при повышенной влажности) подвержены одновременному влиянию износа и коррозии, что приводит к более интенсивной деградации материала. Одним из перспективных методов защиты поверхности металлических изделий от износа и коррозии является нанесение покрытий [1, 2].

В настоящей работе методом электроискрового осаждения в вакууме с использованием электродов Cr-Ni-Co и Cr-Ni-Co-Cu были нанесены покрытия Fe-Cr-Ni-Co-(Cu) на стальные подложки 30X13. Железо в состав покрытия было введено из подложки, за счёт интенсивного перемешивания материала электрода и самой подложки [3].

Структуру покрытий изучали методом сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, а также рентгенофазового анализа. Химический состав электродов и покрытий определяли методом энергодисперсионной спектроскопии.

Механические свойства определяли методом наноиндентирования с использованием нанотвердомера Nanohardness testser (CSM Instruments).

Трибокоррозионные испытания в искусственной морской воде проводили с использованием трибометра, оснащенного специальной трехэлектродной ячейкой, позволяющей регистрировать электрохимический потенциал с использованием потенциостата «Votalab PST-050» в процессе трибологических испытаний по схеме «шарик-диск». Искусственная морская вода была приготовлена в соответствии со стандартом ASTM D1141-98. Приложенная нагрузка составляла 5 Н, дистанция пробега 500 м, линейная скорость в ходе испытания составила 10 см/с. В качестве контртела использовался шарик из Al_2O_3 диаметром 6 мм.

Шероховатость поверхности покрытий и профили дорожек износа оценивались с помощью оптического профилометра.

Определение антибактериальной активности на покрытиях проводили с использованием штамма *Bacillus cereus* Arc30 при инкубировании в физиологическом растворе. Бактериальные клетки выращивали на плотной питательной среде Mueller Hinton Agar (HiMedia, Индия).

Структура покрытий Fe-Cr-Ni-Co-(Cu) представляла собой однофазный твердый раствор Fe, Cr, Ni, Co и Cu с ГЦК решеткой. Морфология высокоэнтропийных покрытий плотная и однородная, без видимых дефектов по всей площади.

Толщина покрытий с медью составила 30 мкм, а покрытий Fe-Cr-Ni-Co 55 мкм.

Твёрдость покрытий FeCrNiCo и FeCrNiCo-Cu составляла 4,7 и 4,4 ГПа, а модуль упругости, соответственно, 210 и 170 ГПа.

Покрытия обладали высокой износо- и коррозионной стойкостью в морской воде. Коэффициент трения покрытий во время трибокоррозионных испытаний в искусственной морской воде составил 0,20-0,26, а приведённый износ $3,7 - 4,2 \times 10^{-6} \text{ мм}^3/\text{Нм}$. При отсутствии трения, покрытия также показали высокую коррозионную стойкость, потенциал свободной коррозии составил +50 мВ, плотность тока коррозии снизилась с 500 нА/см² (30X13) до 60 нА/см² (Co-Cr-Ni).

Легирование покрытий медью позволило улучшить противообрастающие свойства покрытий: через 6 ч происходило снижение численности КОЕ на 3 порядка, а через 24 ч содержание бактерий не было обнаружено.

Работа была выполнена в рамках проекта РНФ №20-79-10104 «Разработка твердых гидрофобных покрытий, обладающих противообрастающим, антиледовым, и самозалечивающим эффектом, предназначенных для защиты объектов морской и прибрежной инфраструктуры от трибокоррозионного, абразивного и кавитационного износа».

1. Bin Xia, Shengguo Zhou, Yongxin Wang, Hao Chen. Multilayer architecture design to enhance load-bearing capacity and tribological behavior of CrAlN coatings in seawater. *Ceramics International*. 2021, V. 47, P. 27430-27440
2. Liu Z.X., Li Yong, Xie X.H., Jun Qin. The tribo-corrosion behavior of monolayer VN and multilayer VN/C hard coatings under simulated seawater. *Ceramics International*. 2021 V. 47, P. 25655-25663.
3. Kuptsov K.A., Antonyuk M.N., Bondarev A.V., Sheveyko A.N., Shtansky D.V. Electrospark deposition of wear and corrosion resistant Ta(Zr)C-(Fe,Mo,Ni) coatings to protect stainless steel from tribocorrosion in seawater. *Wear*. 2021, V. 486–487, P. 1-11.

Исследование электрических свойств самоорганизованных островковых пленок полярных молекул C₆₀F₁₈

А.В. Горячевский¹, Л.П. Суханов^{1,2}

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

²Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный

В работе изучены электрические свойства молекул фторида фуллерена C₆₀F₁₈ [1,2], обладающих высоким электрическим дипольным моментом [3], при их физической адсорбции на различных поверхностях с целью исследования возможности создания интерфейсов с заданными физико-химическими характеристиками и управления их свойствами. Данное исследование может быть использовано для интерпретации экспериментально полученных распределений электростатического потенциала (ЭП) адсорбированных наноструктур в рамках метода сканирующей микроскопии квантовой точки [4].

Молекулы фторида фуллерена C₆₀F₁₈ при адсорбции на различных поверхностях образуют островковую пленку с гексагональной плотноупакованной структурой внутри нее [1,2]. Это открывает возможность создания переходных слоев на границе различных материалов с целью управления переносом заряда между ними и создания таким образом новых электронных устройств и элементной базы молекулярной электроники.

Методами теории функционала плотности промоделировано распределение ЭП однослойных и многослойных, плотноупакованных и разреженных, а также упорядоченных и разупорядоченных ансамблей молекул фторфуллерена C₆₀F₁₈ [1,2], и их воздействие на подложку. В данной работе были использованы данные по квантово-химическому расчету электрического поля отдельной молекулы C₆₀F₁₈ [3]. По рассчитанному распределению ЭП молекулы было промоделировано распределение ЭП кластеров молекул C₆₀F₁₈, наблюдавшихся ранее в экспериментах [1,2]. Были получены двумерные срезы трехмерной пространственной карты ЭП для однослойных и многослойных кластеров молекул фторфуллерена. Моделирование островков показало, что ЭП данных структур является немонотонным и сильно осциллирует вблизи молекулярной структуры. Также промоделирован ЭП от разреженных структур, моделирующих разрозненные отдельные молекулы, адсорбированные на подложке. ЭП разреженного кластера осциллирует, начиная с более далеких расстояний, чем в случае плотноупакованного кластера.

Теоретическими расчетами показано подтвержденное экспериментально [2] наличие расщепления F_{1s} уровней молекулы в электрическом поле, направленном вдоль оси симметрии третьего порядка молекулы (линейный эффект Штарка). По характеру взаимодействия молекул адсорбата с подложкой и друг с другом, влиянию коллективных электростатических эффектов на структуру монослоя и сдвигу островных электронных уровней сделаны выводы о присутствии локальных электрических полей над островковой пленкой и в приповерхностной области подложки, процессе роста пленки.

Результаты квантово-химического моделирования показывают наличие ЭП вблизи адсорбированных молекулярных структур и его неоднородность и немонотонность, а также наличие напряженности электрического поля, что говорит о возможности значительного воздействия на подложку со стороны пленки. Разные по структуре кластеры демонстрируют различный характер поведения ЭП вблизи поверхности подложки, что может быть использовано для управляемого изменения электронных свойств поверхности и создания на ней различных электронных устройств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90246.

1. Bairagi K., Bellec A., Chumakov R.G. et al. STM study of C₆₀F₁₈ high dipole moment molecules on Au(111) // Surf. Sci. 2015. Vol. 641. P. 248–251.
2. Горячевский А.В., Суханов Л.П., Лебедев А.М. и др. Экспериментальное наблюдение островковых пленок полярных молекул C₆₀F₁₈ на поверхности высокоориентированного пиролитического графита // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2019. № 10. P. 52–59.
3. Суханов Л.П., Чумаков Р.Г., Горячевский А.В. и др. Исследование электронных и электрических свойств полярной молекулы C₆₀F₁₈ на поверхности Au(111) // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2018. № 8. P. 30–37.
4. Wagner C., Green M., Leinen P. et al. Scanning Quantum Dot Microscopy // Phys. Rev. Lett. 2015. Vol. 115. P. 026101.

Разработка новых композиционных материалов объемноармированной конфигурации на основе системы Ti/TiB₂ для напыления износостойких покрытий, эффективных при воздействии отрицательных температур

М.Е. Гошкодера, Т.И. Бобкова

НИЦ «Курчатовский институт»- ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

В современной металлургии уделяется большое внимание созданию новых композиционных порошков на основе сочетания различных металлических и неметаллических компонентов для напыления функциональных покрытий с улучшенным комплексом свойств [1]. В ряде случаев, такие покрытия обладают более высокими физико-механическими свойствами, чем напыленные из традиционных материалов. Создание металломатричных композитов (ММК) новых классов позволяет достичь необходимого уровня эксплуатационных свойств покрытий деталей и узлов для изделий, отвечающих современным требованиям. При разработке ММК в настоящее время внимание исследователей привлекают бескислородные тугоплавкие соединения, важное место среди которых занимают бориды переходных металлов и сплавы на их основе [2, 3].

Целью настоящей работы является разработка материалов с объемноармированной конфигурацией на основе системы Ti/TiB₂ для газодинамического напыления композиционных покрытий и исследование их свойств, таких как твердость, пористость, фазовый состав, коррозионная стойкость и износостойкость. Определение перспективной сферы применения разработанных покрытий.

Для разработки композиционного порошка использовался механохимический синтез в высокоэнергетической установке (истираторе вибрационном чашевом «ИВЧ-3»), в качестве исходных компонентов были выбраны матричный порошок титана и армирующий компонент- тонкодисперсный порошок диборида титана. Было подготовлено 3 состава с разным массовым содержанием армирующего компонента: состав №1 – 10%, состав №2 – 20% и состав №3 – 30% [4]. Механосинтез проводился при режиме вращения внутренних элементов чаш со скоростью 1200 об/мин, в течении 3 минут.

Напыление производилось с помощью микроплазменного метода [5], с использованием установки «УГНП-7/2250». Исследование свойств напыленных покрытий было проведено на оборудовании: микротвердомер «ИМТ-3»; оптический микроскоп «Leica DM-2500»; рентгеновский дифрактометр «Bruker D8 Advance»; климатическая камера «Espec SU-261»; машина для испытания материалов на трение «2168 УМТ».

Для изучения значений твердости и пористости были изготовлены поперечные микрошлифы композиционных покрытий. В покрытиях из разработанных композиционных порошков были достигнуты следующие результаты: №1 – 680 HV и 6,4% пористости; №2 – 820 HV и 4,2% пористости; №3 – 997 HV и 3,7% пористости. С повышением содержания диборида титана существенно возрастает твердость покрытия, а также снижается пористость. В качестве наиболее перспективной системы определен состав №3, так как для покрытия на его основе характерно наивысшее значение твердости при наименьшем значении пористости.

Расшифровка дифрактограмм покрытий говорит о наличии рефлексов Ti и TiB, а также присутствии диоксида титана TiO₂ модификации рутил. Известно, что до температуры 800°C окисный слой состоит исключительно из TiO₂, со структурой рутила [6,7]. В результате микроплазменного напыления, за счет температурного воздействия и насыщения титаном, TiB₂ меняет стехиометрию и переходит в фазу TiB. Физико-механические свойства не претерпевают существенного снижения, так как показатель твердости у порошка диборида титана достигает 35 ГПа, а у бориды титана 32 ГПа.

Для исследования коррозионной стойкости покрытий было подготовлена серия образцов с покрытиями из порошка титана марки ПТОМ-1 и композиционных порошков №1, №2 и №3. Проведенные лабораторные ускоренные испытания, имитирующие климатические воздействия влаги и низких температур, переход через нулевую температуру – процесс размораживание/замораживание, заключались в циклическом воздействии температур от -60 до +40 °C и пропитке синтетической морской водой. Максимальное время проведения эксперимента достигает 504 часа с изменением температуры в течение 21 цикла. При проведении испытаний в результате щелевой коррозии растворялся материал подложки и продукты окисления идентифицировались на поверхности покрытий в виде осадка рыжего цвета. Рыжий цвет продуктов коррозии свойственен для поражения железа, продуктам коррозии титана соответствует белый цвет. Коррозионная стойкость композиционных покрытий может быть отнесена к группе стойкости «Совершенно стойкие», так как скорость коррозии составила менее 0,001 мм/год.

Исследования износостойкости проводились по кинематической схеме контакта кольцо-кольцо с сопряжением образцов с нанесенным на контактную поверхность композиционным покрытием и контртела из стали марки 45X при режиме: нагрузка – 0,5 МПа; скорость вращения – 100 об/мин.; время – 5 часов. Образец без покрытия был статичным, а образцы с покрытиями находились в движении. В течении всего эксперимента образцы подвергались смачиванию водой. Были получены следующие результаты: у покрытия из состава №1 значение износа – 0,008397 г/км, скорость изнашивания – 0,003797 г/ч; у покрытия из состава №2 значение износа – 0,004481 г/км, скорость изнашивания – 0,002026 г/ч; у покрытия из состава №3 значение износа – 0,003176 г/км, скорость изнашивания – 0,001436 г/ч. Износостойкость у образцов с покрытиями была существенно выше, чем у контртела. По результатам испытаний на износостойкость можно утверждать, что композиционные покрытия с массовым содержанием диборида титана 30% наиболее эффективны в условиях износа трением.

По результатам проведенных исследований очевидно, что покрытия на основе синтезированного композиционного порошка системы Ti/TiB₂ перспективны к использованию в условиях гидрабразивного износа при воздействии отрицательных температур, например на внешних элементах ветроэнергетических установок, а также узлах трения внутренних элементов.

1. Анциферова И.В. Порошковые титановые материалы // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2004. – С. 198-202.
2. Лепаква О. К. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез диборидов титана в системах Ti–B и Ti–B–Fe // Автореф. дис. канд. техн. наук. – Томск: Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, 2000. – 26 с.
3. Медко В. С.; Радкевич М. М.; Третьяков В. П. Технология конструкционных материалов. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого), 2019. – 218 с.
4. Гошкодера М.Е., Бобкова Т.И., Старицын М.В. Исследование процесса синтеза и свойств металломатричных композиционных порошков системы Ti/TiB₂ // Вопросы материаловедения 2021, № 2 (106), Санкт-Петербург. – С. 66-74.
5. Талако Т.Л., Реутенок Ю.А., Ильющенко А.Ф., Лецко А.И., Яковлева М.С., Сироватка В.Л. Композиционные материалы на основе диборида титана для газотермических покрытий с высокой износостойкостью // Новости национальной академии наук Беларуси, № 2, 2015, серия физико-технических наук. – С. 19-24.
6. Цвиккер У. Титан и его сплавы // Берлин – Нью-Йорк. – 1974. – Пер. с нем. М., «Металлургия», 1979. – 512 с.
7. Кузмичева Г.М. Наноразмерные системы с оксидами титана(IV). Получение. Характеризация. Свойства // Тонкие химические технологии / Fine Chemical Technologies 2015 том 10 № 6, с.5-3

Анализ применения износостойких материалов при наплавке уплотнительных поверхностей узлов пар трения трубопроводной арматуры атомных энергетических установок

И.С. Григорьев, к.т.н. С.Н. Галяткин, к.т.н. М.Н. Тимофеев

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

В данной работе проведен обзор износостойких наплавочных материалов на основе кобальта, никеля и железа, применяемых при наплавке трубопроводной арматуры транспортных и стационарных атомных энергетических установок [1-15].

Проанализированы отечественные сплавы и их зарубежные аналоги, включая виды наплавочных материалов, химические композиции, структуры наплавленного металла, влияние элементов на служебные параметры, применение, а также технологические особенности при наплавке.

Рассмотрены перспективы развития износостойких материалов, где особый интерес представляет направление по созданию порошковых материалов на основе железа, позволяющих исключить необходимость или существенно снизить температуру предварительного и сопутствующего подогрева при наплавке уплотнительных поверхностей.

1. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Трубопроводная арматура для атомных станций. НП-068-05 - общие технические требования. – М., 2005. – 96 с.
2. Акционерное общество «Опытное Конструкторское Бюро Машиностроения имени И. И. Африкантова». РИТМ Реакторные установки для атомных ледоколов и оптимизированных плавучих энергоблоков. – 20 с. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.okbm.nnov.ru/upload/iblock/b9e/b9ee7cbe37e03f09c7790068cd6928a0.pdf>
3. Белов Ю.М., Алясов В.В., Михайлов А.Д., Утлинский Г.Г. Наплавка пар трения скольжения главных циркуляционных насосов и арматуры атомных энергетических станций. Наплавка. Опыт и эффективность применения; Киев ИЭС им. Е.О. Патона, 1985 – С. 45-47.
4. Росэнергоатом. Современные реакторы. [Электронный ресурс]. URL: https://www.rosenergoatom.ru/stations_projects/atomnye-elektrostantsii-rossii/sovremennye-reaktory/
5. Гладкий П.В., Переpletчиков Е.Ф., Рабинович В.И. Плазменная наплавка в энергетическом арматуростроении. – Технология, организация и механизация сварочного производства (НИИИНФОРМТЯЖМАШ), 1970, №2, с илл.
6. Yuxiao Wu, Etienne Bousser, Thomas Schmitt, Nabil Tarfa, Fadila Khelfaoui, Réjean René, Jolanta-Ewa Klemberg-Sapieha, Myriam Brochu. Thermal stability of a Stellite/steel hardfacing interface during long-term aging. *Materials Characterization*. Volume 154, August 2019, Pages 181-192
7. Linchun Wang, D.Y. Li. Effects of yttrium on microstructure, mechanical properties and high-temperature wear behavior of cast Stellite 6 alloy. *Wear*. Volume 255, Issues 1–6, August–September 2003, Pages 535-544
8. Зимоглядова Т.А. Повышение износостойкости стали с использованием технологии вневакуумной электронно-лучевой наплавки порошковой смеси самофлюсующегося никелевого сплава в сочетании с ниобием и бором. [Текст]: дис....канд. тех. наук: 05.16.09: защищена: 19.12.2019: утв. 21.10.2021/ Зимоглядова Татьяна Алексеевна. – Новосибирск, 2019. – 189 с.
9. Никелевые и железные самофлюсующиеся сплавы для покрытий [Электронный ресурс]. URL: <http://www.polema.net/nikelevye-samofljusujushhiesja-splavy-dlja-pokrytij.html>
10. Коберник Н.В., Галиновский А.Л., Панкратов А.С. и др. Опыт применения порошковой проволоки в качестве присадочной при наплавке износостойких покрытий; *Электromеталлургия*. – 2020. - №12. – С. 19-25
11. Кожин М.В., Кусков В.Н., Галинский А.А., Копысов Г.А. Применение спеченной ленты ЛС-09Х31Н8АМ2 в качестве антифрикционного материала подшипников насосов атомных реакторов и судовых установок. Нефтегазовый терминал выпуск 8: сборник научных статей Международной научно-технической конференции «Транспорт и хранение углеводородного сырья»; Тюмень. ТюмГНГУ. – 2015., - С. 108-113
12. Gauthier Beaurin, Jean-Philippe Mathieu, Elise Gauthier, Daniel Nelias, Michel Coret, et al.. Microstructural and mechanical properties evolutions of plasma transferred arc deposited Norem02 hardfacing alloy at high temperature. *Materials Science and Engineering: A*, Elsevier, 2011, 528 (15)
13. Стандарт ЦКБА 053-2008 Арматура теплопроводная. Наплавка и контроль качества наплавленных поверхностей. Технические требования. - НПФ «ЦКБА», - 2018. – 65 с.
14. Стандарт ЦКБА 057-2008 Арматура теплопроводная. Коэффициенты трения в узлах арматуры. - НПФ «ЦКБА», - 2008. – 19 с.
15. Разработка наплавочных электродов, заменяющих ЦН-2: Отчет; Центр. научн.-исслед. ин-т технологии и машиностроения «ЦНИИТМАШ»; рук. Яровинский Л.М. –М., 1965. – 74 с. – исполн.: Баженов В.В., Румянцев А.И.

Влияние технологических факторов на свойства металла износостойких наплавки оборудования АЭУ

Л. А. Гуменюк¹, В. С. Скутин¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

В данной работе рассмотрена износостойкая наплавка (типа ЦН-2) для пар трения узла насоса реакторной установки с натриевым теплоносителем.

В зарубежных исследованиях [1, 2, 3] сплавам на основе кобальта типа Stellite уделяют особое внимание, данный класс материалов широко применяется в различных отраслях промышленности. Это обусловлено уникальным сочетанием комплекса механических и трибологических свойств данных материалов: высокой твердостью и прочностью, в том числе при повышенных температурах, превосходной стойкостью к абразивному, кавитационному, эрозионному износу, а также стойкостью к схватыванию и «горячей» коррозии.

В настоящее время в нашей стране износостойкие и уплотнительные наплавки на кобальтовой основе для оборудования АЭУ выполняются преимущественно покрытыми электродами ЦН-2 при ручной дуговой наплавке и кобальтовыми прутками ВЗК при аргонодуговой наплавке неплавящимся электродом с присадкой. Вышеупомянутые технологии имеют ряд технологических проблем.

С целью повышения производительности и качества выполнения наплавленных покрытий широко применяются порошковые проволоки для дуговой наплавки в защитных газах [4], однако, технология наплавки кобальтовыми порошковых проволок в нашей стране отсутствует.

Целью работы является обоснованный выбор технологических параметров аргонодуговой наплавки плавящимся электродом в смеси защитных газов износостойкого покрытия на основе кобальта для оборудования АЭУ, обеспечивающего требуемую твердость и качество наплавленного металла.

Исходные данные: материал узла насоса, работающий в условиях трения, должен обеспечить достаточную работоспособность в течение не менее 140 тыс. часов при температуре до 450 °С.

Для достижения цели работы были поставлены следующие задачи:

- Исследование влияния технологических параметров наплавки на форму и геометрические размеры наплавленных валиков.

- Исследование влияния технологических параметров наплавки на твердость наплавленных валиков.

- Исследование микроструктуры и твердости металла наплавленных валиков.

Наплавка проб проводилась аргонодуговым полуавтоматическим способом в смеси защитных газов порошковой проволокой STELLOY 12-G (K65X32B5C), диаметром 1,2 мм на подложку из стали марки 08X16H1M3.

Предварительный подогрев пластин осуществлялся в электрической печи до температуры 800 °С [5]. Наплавка производилась при варьировании напряжения на дуге и скорости подачи проволоки.

Анализ геометрических параметров и формы наплавленных валиков показал, что при использовании кобальтовой проволоки можно сформировать равномерную и благоприятную для наплавки форму валика. Это подтверждается полученными значениями коэффициента формы валика и коэффициентом формы провара.

Необходимо отметить, что кобальтовая порошковая проволока STELLOY 12-G показала при наплавке валиков характерную особенность – в диапазоне напряжения на дуге от 24 В и до 28 В и при варьировании скорости подачи проволоки от 4 до 7 м/мин сохраняется стабильно высокий коэффициент формы валиков, минимальные значения которого не снижаются менее 10.

Анализ измерений твердости наплавки показал, что при использовании кобальтовой порошковой проволоки STELLOY 12-G наблюдается существенное повышение твердости наплавленных валиков после проведения термообработки при температуре 960 °С в течение 2 ч. (режим термообработки выбран в соответствии с требованиями [5]).

На основании результатов выполненных исследований был выбран оптимальный диапазон параметров аргонодуговой наплавки: $U_d = 24-26$ В, $V_{\text{подачи}} = 4-5$ м/мин, кобальтовой порошковой проволокой STELLOY 12-G (тип K65X32B5C, ВЗК), который позволил обеспечить требуемую твердость в пределах 41,5-51,5 HRC [5].

Установлено, что кобальтовая порошковая проволока STELLOY 12-G (тип K65X32B5C, ВЗК) обладает высокими сварочно-технологическими характеристиками – стабильное горение дуги, хорошая отделимость шлаковой корки, при выборе оптимальных параметров режима наплавки обеспечивается минимальное разбрызгивание и равномерное формирование валиков, а также позволяет формировать равномерную и благоприятную для наплавки форму валика.

На основании результатов исследования взаимосвязи параметров режима наплавки с характеристиками, формой, геометрическими размерами и твердостью валиков наплавленного металла выбраны параметры режима аргонодуговой наплавки.

Выбранные параметры аргонодуговой наплавки позволяют обеспечить требуемое качество износостойкого покрытия, а также высокие и стабильные значения твердости.

1. Martin Kraus, Jaroslav Bystrianský. Analysis of the damage of functional based on the cobalt-resistant abrasion layers. VŠB-TU Ostrava, FMMI, RMTVC, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava, Czech Republic

2. R. M. G. Paes, A. Scheid. Effect of Deposition Current on Microstructure and Properties of CoCrWC Alloy PTA Coatings. Soldag. Insp. São Paulo, Vol. 19, №. 03, p.247-254, Jul/Set 2014

3. T. Lolla, J. Siefert, S. S. Babu, D. Gandy. Delamination failures of Stellite hardfacing in power plants: a microstructural characterisation study. Science and Technology of Welding and Joining, vol 19, no 6, p 476, august 2014.

4. Росерт Р. Сплавы на кобальтовой основе для наплавки, журнал Автоматическая сварка, 2015, №5-6, страницы 108-113.

5. Стандарт ЦКБА 053-2008 Арматура теплопроводная. Наплавка и контроль качества наплавленных поверхностей. Технические требования. - НПФ «ЦКБА», 2018. -16, 31 с.

Электрические и магнитные низкотемпературные эффекты в сверхпроводящих полупроводниковых твердых растворах $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$

Д. В. Денисов, А. Е. Рудоминский, Н. Ю. Михайлин, Р. В. Парфеньев, Д. В. Шамшур

Физико-Технический институт им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург

Узкозонные полупроводники PbTe и SnTe образуют непрерывный ряд твердых растворов замещения $\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z}\text{Te}$. Введение In приводит к формированию в зонном спектре $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ примесной полосы глубоких квазилокальных состояний E_{In} с высокой плотностью, пиннирующей положение уровня Ферми E_F [1]. Уменьшение количества свинца в твердом растворе приводит к смещению E_{In} из зоны проводимости $\text{Pb}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ в валентную зону $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$, при этом в $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ с содержанием свинца $z = 0.65$ реализуется бесщелевое состояние [2]. $\text{Pb}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ характеризуется долговременными релаксационными процессами неравновесных электронов при низких температурах $T < 20$ К [2, 3]; в твердых растворах $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ и в $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ зафиксирован переход в сверхпроводящее (СП) состояние с необычайно высокой для полупроводников критической температурой СП перехода $T_c \leq 4.7$ К [4]. Дополнительный интерес к изучению низкотемпературных свойств $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ вызван его принадлежностью к новому классу материалов – топологических кристаллических изоляторов [5].

В твердых растворах $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{0.84}\text{In}_{0.16}\text{Te}$ при увеличении содержания свинца z наблюдается переход от СП при $z \leq 0.5$ к экспоненциальному росту сопротивления с понижением температуры при $z \geq 0.6$ [6]. При этом в $(\text{Pb}_{0.6}\text{Sn}_{0.4})_{0.84}\text{In}_{0.16}\text{Te}$ реализуется переходное состояние, связанное с подавлением объемной СП.

В данной работе исследован переход СП-диэлектрик в сопротивлении для твердых растворов с более высоким содержанием In - $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{Te}$ при $0.1 < z < 0.9$. Для изучения объемной СП материала были исследованы магнитные свойства $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ с $x = 0.16, 0.20$ в области СП и переходного состояния $z \leq 0.6$. Поликристаллические образцы были изготовлены по металлокерамической технологии [7]. Синтез проводился путем плавания элементарных In, Pb, Sn, Te, взятых в соответствующих пропорциях, в откачанных кварцевых ампулах при температуре $T \approx 900 - 1000$ °С в течение 4–5 ч. Полученные слитки измельчались и прессовались при давлении $P = 2000$ кг/см² при $T = 400$ °С с последующим гомогенизирующим отжигом в вакууме при температуре 600 °С в течение 200 ч. Характерный размер зерна составлял $d \sim 300$ мкм. Рентгеноспектральный микроанализ не выявил следов выпадения второй фазы в исследуемых образцах.

В твердых растворах $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{Te}$ с содержанием свинца $z \leq 0.5$ на зависимостях удельного сопротивления от температуры $\rho(T)$ и магнитного поля $\rho(H)$ наблюдается СП переход. Максимальное значение критических параметров СП перехода наблюдается в образце $(\text{Pb}_{0.4}\text{Sn}_{0.6})_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{Te}$: критическая температура и магнитное поле СП перехода равны $T_c \leq 4.2$ К и $H_{c2}(T = 0 \text{ К}) \leq 45$ кОе, соответственно. Экспоненциальный рост ρ при понижении T наблюдается для составов $z \geq 0.5$. Вид зависимости $\rho(T)$ для образца $z = 0.6$ в области низких температур $T < 5$ К аналогичен наблюдаемому ранее в переходном составе $(\text{Pb}_{0.6}\text{Sn}_{0.4})_{0.84}\text{In}_{0.16}\text{Te}$ [6]. Такая зависимость может быть связана с переходом от объемной к поверхностной проводимости соединения, как это наблюдалось в топологическом изоляторе SmB_6 [8]. На зависимости $\rho(H)$ для состава $z = 0.5$ наблюдается СП переход, а зависимости $\rho(H)$ для составов $z = 0.6, 0.7$ демонстрируют плавное увеличение ρ с ростом магнитного поля, характерное для структур с проводимостью по поверхностным состояниям [4, 5]. Можно предположить, что при $T < 5$ К в составах, находящихся в переходной области, наблюдается изменение характера проводимости с объемной СП на проводимость по поверхностным состояниям.

Нами были изучены зависимости намагниченности $m(T, H)$ в $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ с $x = 0.16, 0.20$ и $z \leq 0.6$. Для составов, характеризующихся СП переходом на зависимостях удельного сопротивления $\rho(H, T)$, на температурных зависимостях намагниченности $m(T)$, полученных при измерениях в режиме охлаждения в нулевом магнитном поле (ZFC), наблюдается эффект Мейснера – выталкивание магнитного поля из материала при $T < T_c$. В переходном образце $(\text{Pb}_{0.6}\text{Sn}_{0.4})_{0.84}\text{In}_{0.16}\text{Te}$ температурные зависимости намагниченности $m(T)$ в малых полях $H < 2$ кОе отличаются меньшей на несколько порядков величиной намагниченности от СП образцов.

Для всех исследуемых образцов на зависимостях $m(H)$ наблюдался гистерезис намагниченности в СП состоянии, связанный с захватом магнитного потока образцом. Также в образцах $x = 0.16, z = 0.3, 0.4$ и $x = 0.20, z = 0.4, 0.5$ вблизи H_{c2} при возрастании и спаде магнитного поля был обнаружен дополнительный экстремум – пик эффект [9, 10]. Это явление, ранее обнаруженное в Nb [11], ВТСП керамиках [12] и других материалах [13, 14], связывают, например, с переходом вихревой решетки от упорядоченного состояния к неупорядоченному с ростом магнитного поля [13]. В образце $(\text{Pb}_{0.6}\text{Sn}_{0.4})_{0.84}\text{In}_{0.16}\text{Te}$ на зависимостях $m(H)$ наблюдается падение амплитуды гистерезиса намагниченности на несколько порядков по сравнению с другими СП образцами, которое может быть также связано с уменьшением объема СП фазы соединения по сравнению с твердыми растворами $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ с меньшим содержанием свинца. При $T < 3$ К на зависимостях $m(H)$ для этого образца можно выделить диамагнитный вклад нормального состояния, парамагнетизм, выходящий на насыщение при увеличении поля и гистерезис, который, предположительно, связан с остаточной сверхпроводимостью.

Таким образом, в данной работе было изучено влияние состава соединения на электрические и магнитные свойства серии образцов $(\text{Pb}_z\text{Sn}_{1-z})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ с различным содержанием свинца и индия. Было установлено, что увеличение содержания свинца $z < 0.6$ в соединении приводит к переходу от СП состояния материала при низких температурах к зависимостям, характеризующихся экспоненциальным ростом удельного сопротивления с уменьшением T при $z \geq 0.6$. $(\text{Pb}_{0.6}\text{Sn}_{0.4})_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ в зависимостях $\rho(T, H)$ демонстрирует промежуточное состояние, что может быть связано с переходом от объемной к проводимости по поверхностным состояниям. Изучение магнитных свойств подтверждает предположение о подавлении объемной СП в составах, находящихся в переходной области.

1. Абрикосов Н.Х., Шелимова Л.П., М., Наука (1975).
2. В.А. Akimov, N.B. Brandt, S.A. Bogoslovskiy et al., Письма в ЖЭТФ 29, 11 (1979).
3. Akimov V.A. et al., Phys. Stat. Sol. A, 137, 1, (1993).
4. R. Zhong et al., Phys. Rev. B, 91, 195321 (2015).
5. R. Zhong et al., Crystals 7, 55 (2017)
6. В. И. Козуб и др., Письма в ЖЭТФ, 84, 1, (2006)
7. Р.В. Парфеньев, Д.В. Шамшур, С.А. Немов ФТТ, 43, 10, (2001).
8. S. Wolgast et al., Physical Review B 88, 180405(r) (2013)
9. N. Yu. Mikhailin et al., Low Temperature Physics, 45, 2 (2019)
10. D. V. Denisov et al, Physica C, 579, 1353755 (2020)
11. Daniilidis N. et al., Physical Review B. 75. 10.1103 (2006).
12. L.M. Fisher et al., Solid State Communications, 73, 10, (1990)
13. Johannes Hecher et al., Supercond. Sci. Technol. 27 075004 (2014)
14. D. Miu et al., Supercond. Sci. Technol. 25, 7 (2012)

Полимерные композиционные материалы для применения в строительной индустрии

А.А. Евдокимов, А.П. Петрова, А.Е. Раскутин, С.И. Мишкин, В.С. Дышенко

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации,
г. Москва

В настоящее время на территории Российской Федерации существует большое количество автомобильных дорог, которые проходят через районы, где возведение мостов с применением крупногабаритных железобетонных конструкций трудоёмко и затратно из-за природных особенностей (например, вечная мерзлота или горные районы). Для снижения трудоёмкости и затрат оптимально использовать строительные конструкции из ПКМ, которые изготавливают в непосредственной близости от места строительства и устанавливают без применения тяжёлого строительного оборудования благодаря меньшей массе конструкций из ПКМ по сравнению со стальными и железобетонными. Для получения ПКМ с такой областью применения наиболее целесообразно использовать в качестве наполнителя плетёные преформы.

Целью данной работы является разработка технологий получения композиционных материалов нового поколения и конструктивных решений для применения при строительстве быстровозводимых мостовых сооружений с использованием в качестве надземных частей опор арочных элементов и профилированного настила.

Для выполнения поставленной цели были разработаны ПКМ: конструкционные углепластики марок ВКУ-51, ВКУ-51И и стеклопластик марки ВПС-58, изготавливаемые методом вакуумной инфузии на основе эпоксивинилэфирного связующего марки ВСВ-43 и применяемые при строительстве конструкций быстровозводимых мостовых сооружений (полый углепластиковый арочный элемент и профилированный настил из стеклопластика).

Кроме того, были разработаны строительные технологии, позволившие использовать арочные элементы и профнастил при возведении быстровозводимого мостового сооружения. Согласно разработанным технологиям, на заранее возведённый фундамент вручную или с применением автокрана монтируются арочные элементы весом примерно 50-60 кг, а затем заполняются бетоном.

Для прогнозирования возможных разрушений на ранней стадии, особенно при возникновении формажорных ситуаций, требуется непрерывный мониторинг всей инженерной конструкции.

С целью получения достоверной информации и обеспечения возможности непрерывной передачи данных о деформациях и температуре мостовой конструкции разработана технология интегрирования сенсорного элемента на основе брегговских решеток в углепластик с получением таким образом информкомпозиата: ПКМ, в котором размещены оптоволоконные сенсоры, объединенные в единую сеть контроля (марки ВКУ-51И). Данный материал также применялся при изготовлении арочного элемента.

Разработанные ПКМ прошли общую квалификацию и выпущены паспорта на них, а строительные конструкции, изготовленные из них, были испытаны на прочность на специализированном стенде с приложением как статической, так и динамической нагрузки. Среднее значение прочности арочного элемента, заполненного бетоном, составило 32 тонны, профилированного настила – 6,4 тонны.

С целью подтверждения пригодности разработанных материалов и технологий для изготовления автомобильных мостов, был построен первый в РФ двухполосный автомобильный арочный мост в р.п. Языково Карсунского района Ульяновской области с двумя пешеходными переходами длиной 15 метров и максимальной нагрузкой 100 тонн. Тем самым было экспериментально подтверждено:

- разработанные ПКМ, применённые в строительных конструкциях позволят сократить срок строительства мостов до 2х месяцев за счет меньшего использования бетона, а также сократить стоимость строительства на 30% за счет уменьшения общей трудоёмкости более чем в 2 раза в сравнении со стандартным железобетонным балочным мостом. При этом срок безремонтной эксплуатации мостового сооружения повысится до 50 лет;

- использование разработанного информкомпозиата в конструкции моста позволит осуществлять непрерывный мониторинг всей инженерной конструкции, получая достоверную информацию о деформациях и температуре непосредственно от несущих арочных элементов. Причем делать это в режиме реального времени, тем самым заблаговременно до момента достижения критических необратимых деформаций на объекте принять меры для устранения и недопущения аварийной ситуации. Возможность объединения сенсорных элементов в единую сеть контроля обеспечивает удобство эксплуатации;

- разработанные материалы, используемые в строительных конструкциях, уже применены на реальном объекте, тем самым подтверждена их «профпригодность».

Работа выполнена в рамках реализации комплексного научного направления 13.2. «Конструкционные ПКМ». («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [1,2].

1.Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года //Авиационные материалы и технологии. 2015. № 1.

2.Каблов Е.Н. Тенденции и ориентиры инновационного развития России / Сб. науч.-информац. материалов. 3-е изд. М.: ВИАМ. 2015.

Синтез органорастворимых производных хитозана, графтированного полилактидом, для биомедицинского применения

А.А.Захаревич¹, Ю.Д. Загошкин¹, Т.Е. Григорьев¹

¹НИИ Курчатовский институт, г. Москва

Хитин — это природный азотсодержащий полисахарид, состоящий из звеньев N-ацетил-D-глюкозамина, соединенных между собой β-(1→4)-гликозидными связями. Благодаря прочности, слабой растворимости и способности образовывать белковые комплексы, хитин является главным структурным компонентом экзоскелета насекомых и ракообразных, а также выполняет защитную и опорную функции в клеточных стенках микроорганизмов, некоторых водорослей и бактерий. Для научного и практического применения хитин представляет интерес главным образом в качестве сырья для производства хитозана [1].

Хитозаном называется линейный полисахарид, продукт частичного деацетилирования хитина. Молекулы хитозана наряду с N-ацетил-D-глюкозаминовыми звеньями содержат структурные единицы D-глюкозамина со свободными аминогруппами. Аминогруппы хитозана способны связывать протоны, приобретая положительный заряд, что обуславливает лучшую, по сравнению с хитином, растворимость хитозана в разбавленных кислотах, а также делает последний хорошим сорбентом (энтеросорбентом) и флокулянт. Медицинское применение хитозана также во многом обусловлено его катионной природой: положительно заряженные группы хитозана позволяют ему взаимодействовать с отрицательно заряженными клеточными мембранами и оказывать цитотоксическое воздействие на клетки патогенных микроорганизмов — бактерий, грибов и дрожжей [2]. Мукоадгезивные свойства хитозана и способность к образованию полиэлектролитных комплексов позволяют использовать полисахарид в системах доставки лекарств. Помимо этого, хитозан отличается превосходной биосовместимостью, способностью к биоразложению, низкой токсичностью в отношении клеток человека, а также возможностью направленной модификации свойств в широких пределах за счет присутствия в молекуле хитозана реакционноспособных функциональных групп: C₂-NH₂, C₃-OH и C₆-OH (в порядке убывания активности) [3].

Однако, несмотря на многочисленные преимущества, некоторые возможности применения хитозана сильно ограничены его недостаточной растворимостью. При этом повышение степени деацетилирования (DD) хитозана до значений выше 90—95%, приводит не только к улучшению растворимости, но и к резкому падению молекулярной массы полимера (ММ), что значительно снижает его биологическую активность [4].

Для улучшения растворимости в разбавленных кислотах без снижения ММ применяют химическую модификацию хитозана по C₂-аминогруппе. Однако, наряду с водными растворителями, изготовление материалов биомедицинского назначения часто требует применения органических сред, что делает невозможным получение некоторых видов медицинских изделий на основе хитозана. Для улучшения растворимости полимера в органических растворителях часто применяют O-ацилирование, но так как аминогруппы являются наиболее активными элементами структуры полисахарида, параллельно с основной реакцией протекает также N-ацилирование [5].

В настоящем исследовании мы разрабатываем способ получения органорастворимых производных хитозана в широком диапазоне молекулярных масс. Хитозан подвергают ацилированию по C₃-ОН группе, предварительно исключив из процесса наиболее активные C₂-NH₂ группы путем внесения фталоильной защиты. Последующее удаление фталоильной защиты позволяет получить органорастворимый O-ацилированный хитозан, к которому могут быть привиты цепи полилактида. Проведение сополимеризации хитозана и лактида в растворе является отличительной особенностью данной работы и позволяет исключить негативные эффекты, возникающие из-за неоднородности реакционной системы и плохого теплопереноса при гетерофазном процессе.

Химической модификации предшествовало тщательное изучение свойств исходных биополимеров с целью повышения степени достоверности исследования и устранения неточностей. Кроме того, систематический подход к работе дает возможность составить наиболее полное представление о роли молекулярной массы и степени деацетилирования в определении свойств модифицированных хитозанов.

Полученные графт-сополимеры хитозана с полилактидом сочетают в себе полезные свойства как синтетических, так и биогенных полимеров: с одной стороны, они имеют высокую биосовместимость и низкую токсичность, а с другой — набор контролируемых и управляемых в зависимости от целей и области применения свойств. К примеру, хитозан в составе сополимеров с лактидом при биоразложении материалов их основе способен нивелировать вредное влияние снижения pH прилегающих к импланту тканей.

Кроме того, применение в сополимерах модифицированного O-ацилированного хитозана позволит расширить возможности получения нетканых материалов, гелей и пористых матриц за счет растворимости в органических средах.

Работа выполнена при поддержке НИИ «Курчатовский институт» в рамках приказа № 1058 от 02.07.2020

1. Wenqian Wang Chitosan derivatives and their application in biomedicine / Wenqian Wang et al. — International Journal of Molecular Science, 21 (2), 2020, pp. 487-513.
2. Варламов В.П. Хитин/хитозан и его производные: фундаментальные и прикладные аспекты / В.П. Варламов и др. — Успехи биологической химии, т. 60, 2020, стр. 317-368.
3. Nabel A. Negm Advancement on modification of chitosan biopolymer and its potential applications / Nabel A. Negm et al. — International Journal of Biological Macromolecules, 152, 2020, pp 681-702.
4. Lim S.H. Review of chitosan and its derivatives as antimicrobial agents and their uses as textile chemicals / S.H. Lim et al. — Journal of Macromolecular Science, 43 (2), 2003, pp. 223-269.
5. Piegat A. The importance of reaction conditions on the chemical structure of N,O-acylated chitosan derivatives / A. Piegat et al. — Molecules, 24, 2019, pp. 3047-3063.

Разработка технологий производства листового проката из высокопрочной хладостойкой стали

Н.А. Кондратьев, Т.И. Князюк, Н.С. Новоскольец

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

С каждым годом в различных отраслях промышленности растет потребность в производстве высокопрочного листового проката небольших толщин, в том числе и в судостроении. Освоение арктических регионов требует применения хладостойкой стали. С повышением прочности снижается металлоемкость сварных конструкций: корпусов судов, стрел грузоподъемных кранов и т.д., эксплуатирующихся при температурах до минус 60°C. Поэтому появилась необходимость в создании листов малых толщин (5-15 мм) из хладостойкой стали. Помимо судостроения перспективно применение листового проката для башен ветроэнергетических установок (ВЭУ).

Следует отметить, что башни ВЭУ обычно изготавливаются из строительных сталей категории прочности 355 МПа, однако в связи с тенденцией увеличения мощности и, соответственно, высоты ВЭУ становятся актуальными более прочные стали с пределом текучести 420-460 МПа, обладающие достаточным уровнем хладостойкости для применения в оффшорной зоне. Листовой прокат толщиной 5 мм указанной прочности для судостроения не освоен [1].

Цель работы заключается в разработке режимов горячей прокатки листового проката толщиной 5 и 15 мм из высокопрочной хладостойкой стали с пределом текучести 420-460 МПа в лабораторных условиях и рекомендаций для их промышленного производства.

Основываясь на опыте проведенной работы по исследованию кинетики рекристаллизации аустенита предложенной стали [2], а также учитывая влияние предварительной деформации на фазовые превращения, была предложена технологическая схема прокатки листового проката толщиной 5 и 15 мм применительно к непрерывному стану горячей прокатки: с минимальными междеформационными паузами, ускоренным охлаждением после прокатки и дальнейшей смоткой проката в рулон.

Горячая прокатка листов толщиной 5 мм осуществлялась по четырем режимам. В результате анализа микроструктуры (размера зерна феррита) и механических свойств полученного листового проката с феррито-перлитной структурой был выбран наиболее оптимальный режим.

В результате анализа механических свойств и микроструктуры полученного листового проката толщиной 15 мм было определено, что предложенные режимы требуют корректировки, так как требуемая хладостойкость обеспечивается только до температуры -40°C.

На основании проведенных исследований были разработаны рекомендации для промышленного изготовления стального проката толщиной 5 и 15 мм из хладостойкой стали с гарантируемым пределом текучести 420-460 МПа.

1. Сыч О.В., Хлусова Е.И., Орлов В.В. Хладостойкие стали категорий прочности 355-500 МПа для применения в Арктике. часть 1 // Тяжелое машиностроение. 2019. № 9. С. 15-21.
2. Сыч О.В., Коротовская С.В., Хлусова Е.И., Новоскольец Н.С. Разработка термодеформационных режимов прокатки низколегированной «арс»-стали с квазиоднородной ферритно-бейнитной структурой // Вопросы материаловедения. – 2021. - № 2 (106). – С. 5-17.

Разработка универсального тест-объекта для рентгеновских методов визуализации и микроскопии

А.С. Коротков¹, И.И. Лятуш¹, П.Н. Медведская¹, И.И. Снигирева²,
А.А. Снигирев¹

¹ Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, 236041, Калининград

² Европейский центр синхротронного излучения, 38043, Гренобль, Франция

Ключевым преимуществом рентгеновских методов визуализации, по сравнению с оптическими методами, является большая глубина проникновения рентгеновского излучения в вещество и малая длина волны. Эти свойства рентгеновских лучей позволяют наблюдать в микро- и нано- масштабе внутреннюю структуру объектов, не разрушая их. Благодаря этому, рентгеновская микроскопия является высокоинформативным инструментом исследования в целом ряде областей науки: от физики и химии, до биомедицины и археологии [1, 2].

Знание истинных значений размеров исследуемых объектов позволяет выполнять метрологические исследования ответственных изделий методами неразрушающего контроля. Для этих задач используются специальные тестовые структуры для исследования и аттестации рентгенооптических систем и отдельных оптических элементов на лабораторных и синхротронных источниках рентгеновского излучения.

Большинство рентгеновских методов визуализации, в частности когерентная рентгеновская микроскопия используется в области жесткого рентгеновского излучения - от 8 до 30 кэВ. Появление высокопропускающих преломляющих рентгеновских линз [3], в том числе микрооптики [4], в сочетании с новым поколением источников СИ являются причиной пересмотра требований к высокопропускающим тестовым структурам для рентгенооптических приложений. Малый размер структур позволяет использовать их в сочетании с короткофокусными микрообъективами, а использование стойких материалов требуется из-за высокой плотности фотонов на современных источниках синхротронного излучения (СИ).

Для изготовления тестовых структур в основном используют электронную литографию, которая позволяет получать структуры с точностью до нескольких десятков нанометров. Однако эта технология имеет свои недостатки, главные из которых - низкая производительность, возникающий “эффект близости” [5] и многостадийность процесса изготовления. Поэтому, для решения задачи изготовления высокопропускающей тестовой структуры для рентгеновской микрооптики был выбран метод ионно-лучевой литографии (ИЛЛ), имеющий пространственное разрешение около 5 нм [6] и лучше. В отличие от других видов литографии, этот метод является безмасочным, что позволяет достаточно быстро и с высокой точностью создавать сложные трехмерные структуры сфокусированным ионным пучком непосредственно на поверхности любого твердого материала.

Изготовление и характеристика высокопропускающих тестовых объектов методом ИЛЛ было выполнено на двухлучевой станции Zeiss Crossbeam 540, входящей в состав уникальной научной установки «Научно-образовательный многофункциональный комплекс подготовки и проведения синхротронных исследований» (УНУ «SynchrotronLike»). Разработанные тестовые объекты представляют собой структурированные пленки золота, толщиной 250 нм, 500 нм, 750 нм. Дизайн тестовой структуры состоит из набора элементарных составляющих - равносторонних треугольников с размером стороны от 10 мкм и меньше. Малые размеры тест-объектов в сочетании с возможностями современных FIB-SEM систем позволяют изготавливать тестовые структуры совмещенные с различными рентгенооптическими элементами по принципу “лаборатории на чипе” (lab on chip) для приложений на источниках СИ нового поколения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-30009).

1. Kirz J., Jacobsen C. The history and future of X-ray microscopy // Journal of Physics: Conference Series. 2009. (186). С. 012001
2. Bohic S. et al. Synchrotron hard x-ray microprobe: Fluorescence imaging of single cells // Appl. Phys. Lett. 2001. Т. 78. № 22. С. 3544-3546
3. Snigirev A. et al. A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays // Nature. 1996. Т.
4. Medvedskaya P. et al. Diamond refractive micro-lenses for full-field X-ray imaging and microscopy produced with ion beam lithography // Opt. Express. 2020 № 4. С. 4773
5. Van de Kraats A., Muraoralili R. Proximity effect in e-beam lithography // Atlanta, Georgia: Nanotechnology Research Center, Georgia Institute of Technology. – 2005.
6. Giannuzzi L.A., Prenitzer B.I., Kempshall B.W. ion - Solid Interactions // Introduction to Focused Ion Beams. : Springer US, 2005. С. 13–52

Влияние высокотемпературного отжига на электрические, газочувствительные и структурные свойства тонких пленок α -Cr₂O₃

Б.О.Кушнарёв, А. В. Алмаев

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Корундобразный оксид хрома α -Cr₂O₃ представляет интерес для разработки сенсоров паров углеводородов с низкими рабочими температурами [1] и прозрачных проводящих оксидов (ТСО) с дырочным типом проводимости [2]. Перспективным является исследование анизотропных гетеропереходов на основе оксидов галлия и хрома со структурой корунда для создания силовых диодов [3]. Существует необходимость в получении знаний об электрофизических и оптических свойствах α -Cr₂O₃. Кроме этого, можно отметить слабое развитие методов синтеза данного соединения.

В качестве перспективного метода синтеза α -Cr₂O₃ с точки зрения стоимости и производства пленок большой площади с контролируемыми свойствами является магнетронное распыление. Ранее, нами при помощи магнетронного распыления были синтезированы тонкие поликристаллические пленки α -Cr₂O₃ и исследованы их электрические, газочувствительные и структурные свойства [1]. Была выявлена перспективность разработки сенсоров паров углеводородов на основе этих пленок с рабочими температурами 25 – 200 °С. Показана возможность управления газочувствительными свойствами тонких пленок оксида хрома путем изменения условий отжига, главным образом температуры $T_{отж}$ в интервале 350 – 450 °С. Предложен механизм сенсорного эффекта в тонких пленках α -Cr₂O₃. α -Cr₂O₃ обладает высокой температурой плавления, 2435 °С, что дает возможность подвергать пленки высокотемпературным отжигам. Кроме этого, существует необходимость развития методов легирования α -Cr₂O₃, т.к. стехиометрический нелегированный α -Cr₂O₃ зачастую демонстрирует диэлектрические свойства [2]. В качестве перспективных примесей акцепторного типа выступают элементы Mg, Ni и N [2]. α -Cr₂O₃ n-типа проводимости пока не удалось синтезировать. Настоящая работа посвящена исследованию синтеза тонких пленок α -Cr₂O₃ и влиянию отжига при $T_{отж} = 900$ °С на их структурные, электрофизические и газочувствительные свойства.

Тонкие пленки α -Cr₂O₃ были получены методом ВЧ магнетронного распыления мишени хрома (99,95%) в кислородно-аргоновой плазме. В качестве подложек использовали пластины α -Al₂O₃ с ориентацией (0001). Стоит отметить, что рассогласование кристаллических решеток α -Cr₂O₃ и α -Al₂O₃ составляет ~4 %. Толщина полученных пленок составляла 150 нм. Для введения никеля в объем пленок α -Cr₂O₃ был использован прием послойного напыления Cr₂O₃/NiO/Cr₂O₃ на подложку α -Al₂O₃. Далее слоистые структуры обозначим α -Cr₂O₃-Ni. Ожидалось, что в процессе высокотемпературного будет иметь место взаимная диффузия атомов хрома и никеля. Толщина верхнего и нижнего слоев α -Cr₂O₃ составляла 70-75 нм. Слой NiO, толщиной 15 нм, формировался при помощи распыления мишени никеля (99,999 %). После напыления пластины с пленками α -Cr₂O₃ и α -Cr₂O₃-Ni подвергалась отжигу при

$T_{отж} = 900$ °С в атмосфере аргона или воздуха в течение 30 минут. Для исследования электрофизических и газочувствительных свойств полученных пленок на их поверхности формировались Ti/Pt или Pt контакты, соответственно.

На рентгеновских спектрах пленок α -Cr₂O₃ и α -Cr₂O₃-Ni присутствуют пики, соответствующие плоскостям (0006) и (00012) α -Cr₂O₃, а также интенсивные пики от подложки, соответствующие этим же плоскостям. Для слоистых структур при $2\theta \approx 95^\circ$ наблюдается пик слабой интенсивности, который можно ассоциировать с NiO, согласно данным JCPDF 78-0643. Согласно сканирующей электронной микроскопии пленки α -Cr₂O₃ являются пористыми, с размером пор до 100 нм. При более низких $T_{отж}$ поверхность пленок α -Cr₂O₃ является сплошной, без пор. Для пленок α -Cr₂O₃-Ni на поверхности были обнаружены агломераты в форме чешуек с размером до 250 нм. Энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия α -Cr₂O₃-Ni показала наличие 1.45 мас. % никеля в пленках после отжига.

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) пленок оксида хрома, подвергнутых отжигу, были исследованы в диапазоне напряжений 0 – 200 В. Пленки α -Cr₂O₃ характеризуются высоким сопротивлением и в области температур нагрева $T = 25 - 100$ °С их ВАХ являются нелинейными. С дальнейшим повышением T до 750 °С ВАХ пленок с Pt контактами являются линейными. Ток пленок Cr₂O₃-Ni на 3-4 порядка величины выше тока α -Cr₂O₃, что свидетельствует о проявлении свойств акцепторной примеси Ni. Помимо ВАХ, для образцов α -Cr₂O₃ и α -Cr₂O₃-Ni были проведены исследования зависимости сопротивления R от температуры, при напряжении 5 В. Сначала измерялась зависимость R от T при повышении температуры, затем при понижении. Результаты измерений показали отсутствие гистерезиса. Стоит отметить, что для пленок, подвергнутых отжигу при более низких температурах, проявляется значительный гистерезис, а его отсутствие позволяет использовать пленки для работы при высоких температурах без проявления дополнительной погрешности. Экспериментально было установлено, что коэффициент Зеебека для пленок α -Cr₂O₃-Ni является положительным в интервале температур 100 – 450 °С и монотонно возрастает с повышением T. Для пленок α -Cr₂O₃ и образцов, подвергнутых отжигу при более низких $T_{отж}$, подобных исследований провести не удалось.

Исследования газочувствительных свойств пленок при воздействии H₂, O₂, NH₃, CO, паров ацетона и воды показали, что чувствительность α -Cr₂O₃ к этим газам примерно в 2-4 раза выше чувствительности пленок с добавкой никеля. Однако низкое сопротивление пленок Cr₂O₃-Ni позволяет измерить отклик на газы начиная с $T = 200$ °С. Общим для пленок, независимо от наличия добавки никеля, являются следующие экспериментальные факты: Высокая чувствительность на воздействие парами ацетона, сопротивление пленок Cr₂O₃ и Cr₂O₃-Ni, при воздействии 0.01 % паров ацетона возрастает на 11 % и 3 %, соответственно, при $T = 600$ °С; Отсутствие чувствительности при $T < 200$ °С; Отсутствие дрейфа характеристик пленок в области высоких температур нагрева, вплоть до 750 °С. Такие пленки могут быть использованы в качестве газовых сенсоров для высокотемпературных приложений. Стоит отметить, что основным критерием для выбора высокотемпературных газовых сенсоров является стабильность параметров при $T > 600$ °С [4].

Исходя из проведенных исследований, можно сделать следующие выводы: Использование магнетронного распыления в качестве способа получения, позволяет синтезировать монокристаллические тонкие пленки α -Cr₂O₃; Метод послойного напыления может быть применен для легирования монокристаллических тонких пленок α -Cr₂O₃ акцепторной примесью никеля; Отжиг при температуре 900 °С позволяет получать пленки обладающие чувствительностью к парам газов при высокой рабочей температуре, что дает возможность их использования в приборах соответствующего типа.

1. Structural, electrical and gas-sensitive properties of Cr₂O₃ thin films / A.V. Almaev, B.O. Kushnarev, E.V. Chernikov, V.A. Novikov, P.M. Korusenko, S.N. Nesov // Superlattices and Microstructures. 151 (2021) 106835.
2. Conducting mechanism in the epitaxial p-type transparent conducting oxide Cr₂O₃: Mg / L. Farrell et al. //Physical Review B. – 2015. – Т. 91. – №. 12. – С. 125202.
3. Perspective: Ga₂O₃ for ultra-high power rectifiers and MOSFETS / S. J. Pearton et al. //Journal of Applied Physics. – 2018. – Т. 124. – №. 22. – С. 220901.
4. High-temperature gas sensors for harsh environment applications: a review / A. Ghosh et al. // CLEAN–Soil, Air, Water. – 2019. – Т. 47. – №. 8. – С. 1800491.

Наноорганизация – фазовое состояние полимерных композитов

Л.В. Соколова, А.В. Лосев

МИРЭА – Российский технологический университет, г. Москва

Явление усиления полимеров активными наполнителями известно достаточно давно (с 1905 года). Однако ни одна предложенная в литературе модель усиления не позволяет создавать композиты с направленно измененными свойствами. Известно, что во время синтеза полимеров формируется их наноорганизация в той или иной степени в зависимости от условий его проведения и химического строения макромолекул, которая вмещает упорядоченные образования разного размера, содержания и строения, соединенные между собой проходными цепями в единую систему. Наноорганизация имеет термодинамическую природу по данным РСА, ДСК и диффузионного метода, а ее упорядоченные образования сформированы фрагментами макромолекул, состоящими преимущественно из *транс*-конформеров, согласно данным ИК-спектроскопии [1–4]. Температурный интервал наноорганизации полимеров определяется, в первую очередь, кинетической гибкостью макромолекул и молекулярной массой [1, 2].

Структуру наноорганизации полимеров можно направленно изменять несколькими способами. Так, в присутствии активного наполнителя формируется мозаичная структура наноорганизации полимерного композита с центрами на его частицах, включающая два – три вида упорядоченных образований большого размера согласно данным РСА в больших углах. Вокруг частиц наполнителя обнаружены два слоя: рыхлый и плотный. Первый слой образуют фрагменты макромолекул с резко и локально пониженной гибкостью вследствие адсорбции их на поверхности наполнителя. Второй слой сформирован нанообразованиями размером 2–12 нм с небольшими средними межплоскостными расстояниями (2.1–4 Å) и с существенно большей прочностью, чем нанообразования в объеме композита. О формировании такого слоя свидетельствует, в частности, рефлекс с максимумом при $2\theta = 21.61^\circ$ на дифрактограмме механической смеси полиизобутилен – оксид цинка и при $2\theta = 41.65^\circ$ в случае смеси *цис*-1,4-полиизопрен – наноразмерный диоксид титана. В полимерной матрице первой смеси обнаружены нанообразования размером 92 нм. В обоих композитах существенно возросло объемное содержание и нанообразований небольшого размера, которые вносят вклад в их аморфное гало.

Структура наноорганизации полимеров, отличающаяся высокой степенью упорядоченности, также кардинально изменяется в присутствии активных наполнителей. Так, наноструктуры размером 12 нм со средними межплоскостными расстояниями 2.15 Å, обусловленные формированием второго слоя вокруг частиц наполнителя, обнаружены в случае механической смеси СКФ-26 – наноразмерный диоксид титана с помощью РСА в больших углах. Установлено, что активный наполнитель в наибольшей степени понижает локально гибкость проходных цепей, адсорбированных на его поверхности, что обуславливает формирование структуры наноорганизации композита с более высокой степенью упорядоченности, чем у исходных полимеров.

Принято считать, что явление усиления пластиков выражено слабее и происходит по иному механизму, так как пластики находятся в стеклообразном состоянии. На примере гомологов полистирола ($M_n = 4.2 \times 10^4$ и 8×10^5) (ПС-1 и ПС-2 соответственно) показано, что природа явления усиления пластиков такая же, как и в случае эластомеров. Установлено, что высокая молекулярная масса полимера создает существенно меньшие стерические препятствия процессу формирования структуры наноорганизации композита.

Температурная предыстория полимера также оказывает влияние на изменение структуры его наноорганизации даже в присутствии активного наполнителя. Так, в случае смеси гомолога ПС-1 с белой сажей с повышением температуры нагревания в прессе (давление 1 МПа) обнаружен рост содержания упорядоченных образований, что сопровождается, в частности, увеличением уровня ее высокоэластической деформации. После предварительного нагревания этих смесей разного состава при 200°C четко проявился плотный слой нанообразований сформированный вокруг частиц белой сажи. Температура распада этого слоя составляет ~380°C и совпадает с температурой разложения композитов. Аналогичный слой, который формируется в случае композитов *цис*-1,4-полиизопрен – белая сажа разного состава, также сохраняется до температуры их разложения при 400°C. Другими словами, полимерные композиты не способны переходить в аморфное фазовое состояние.

1. Соколова Л.В. // Высокомолек. соед. – А. 1987. Т. 29. № 8. С. 1731-1736.
2. Соколова Л.В. // Пластич. массы. – 2006. № 5. С. 13-18.
3. Соколова Л.В. // Высокомолек. соед. – А. 2017. Т. 59. № 4. С. 318-330.
4. Соколова Л.В. // Высокомолек. соед. – Б. 1994. Т. 36. № 10. С. 1737-1749.

Topochemical modification and exfoliation into nanosheets of layered perovskite-like bismuth titanate

I.A. Minich¹, O.I. Silyukov¹, I.A. Zvereva¹

¹*Institute of Chemistry, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg*

Hybrid organic-inorganic compounds based on layered perovskite-like oxides is a new promising class of materials which properties could be tailored by targeted modification of both organic and inorganic parts. Preparation of such materials is recently focused on a stepwise approach including subsequent intercalation and grafting reactions that lead to the formation of bulk hybrid compounds followed by their exfoliation into 2D organically-modified nanosheets. [1] Such hybrid compounds and nanosheets are considered as perspective materials exhibiting photocatalytic, catalytic, ferroelectric, and luminescent properties that could be used as polymer filling agents, building blocks for thin films preparation, components of Li-ion batteries and fuel cells electrodes and etc.

In the present work, we report the results on the synthesis, characterization, and exfoliation of organic-inorganic hybrids based on layered perovskite-like bismuth titanate $\text{H}_2\text{K}_{0.5}\text{Bi}_{2.5}\text{Ti}_4\text{O}_{13}\cdot\text{H}_2\text{O}$ which could be prepared by simple ion-exchange reaction from Ruddlesden-Popper phase $\text{K}_{2.5}\text{Bi}_{2.5}\text{Ti}_4\text{O}_{13}$. [2,3] Organic-inorganic hybrids have been prepared by intercalation and grafting reactions. Intercalation reactions imply acid-base interaction between solid acid and organic bases (usually *n*-amines). Then, the preliminarily intercalated with amines compounds are used as starting materials for grafting reactions, which imply the covalent bonding between the grafting agents (usually alcohols) and inorganic matrix. In this work, we applied *n*-amines intercalated derivatives for reactions with *n*-alcohols. In particular, methylamine *n*-butylamine, and *n*-octylamine-intercalated hybrids were used for reactions with methanol, *n*-propanol, *n*-butanol, *n*-hexanol, and *n*-decanol. Characterization of the obtained samples has been carried out by XRD, TG, CHN analysis, FTIR and Raman spectroscopies, and ¹³C MAS-NMR.

Exfoliation of $\text{H}_2\text{K}_{0.5}\text{Bi}_{2.5}\text{Ti}_4\text{O}_{13}$ into nanosheets was performed for the starting hydrated protonated form and for *n*-amines intercalated derivatives in order to study the influence of preliminary intercalation on exfoliation efficiency. The selected precursors were exfoliated in water solutions of tetrabutylammonium and tetramethylammonium hydroxides by facile stirring and ultrasonication. The obtained suspensions of nanosheets were characterized by UV-vis absorption spectroscopy, dynamic light scattering, inductively coupled plasma spectroscopy, and gravimetry. Nanosheets were coated on preliminarily polyethyleneimine-covered Si substrate by self-assembly procedure and studied by AFM and SEM microscopies. The thickness of obtained nanosheets was shown to be 2.5 - 5 nm, which corresponds to mono- and bilayers of the starting inorganic compound.

The study was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant № 19-33-90050). Authors are also grateful to Saint Petersburg State University Research Park: Center for X-ray Diffraction Studies, Center for Thermal Analysis and Calorimetry, Magnetic Resonance Research Centre, Center for Optical and Laser Materials Research, Center for Chemical Analysis and Materials Research, Centre for Innovative Technologies of Composite Nanomaterials, Centre for Diagnostics of Functional Materials for Medicine, Pharmacology and Nanoelectronics and Interdisciplinary Center for Nanotechnology.

1. Uppuluri R. et al. Chem. Soc. Rev. Royal Society of Chemistry, 2018. Vol. 47, № 7. P. 2401–2430 doi: 10.1039/c7cs00290d.
2. Liu S. et al. Showing Stoichiometric Hydration // Inorg. Chem. 2016. Vol. 55, № 4. P. 1403–1411 doi: 10.1021/acs.inorgchem.5b01913.
3. Minich I.A. et al. // Ceram. Int. Elsevier Ltd and Techna Group S.r.l., 2019. Vol. 45, № 2. P. 2704–2709 doi: 10.1016/j.ceramint.2018.10.004.

Количественный анализ изменения морфологии биомедицинских матриксов при плазменной модификации

А.А. Михуткин¹, Е.В. Ястремский^{1,2}, Т.Д. Пацаев¹, К.Г. Антипова¹, Р.В. Шариков¹, Н.А. Шарикова¹, К.И. Луканина¹, Т.Е. Григорьев¹, Р.А. Камышинский^{1,2}, А.Л. Васильев^{1,2}

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

²*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

Морфология внеклеточных матриксов является определяющей для роста и развития клеток с последующим формированием ткани [1-3]. Матрикс осуществляет не только поддерживающую функцию, но и влияет на общую морфологию будущей ткани. Его морфология влияет на многие клеточные процессы. На матриксах с микро- и наншероховатостями адгезия клеток и их рост улучшаются по сравнению с более гладкими матриксами [1].

Поэтому разработка искусственных внеклеточных матриксов из биополимерных материалов с оптимальными характеристиками для клеточной активности имеет все нарастающее значение для регенеративной медицины. В ней искусственный матрикс, вживленный в тело в месте повреждения, обрастает клетками, которые, пролиферируя и дифференцируясь, формируют ткань, в то время как сам искусственный матрикс деградирует и заменяется на естественный [4].

В качестве искусственных внеклеточных матриксов могут применяться различные типы биополимерных материалов – пленки, губки и нетканые (волоконистые) материалы. Для оптимизации микроструктуры поверхности данных материалов в целях улучшения взаимодействия с клетками в настоящей работе предлагается изменение их шероховатости путём плазменной обработки. Ранее было показано, что подобные способы обработки улучшают биосовместимость искусственных матриксов и условия для роста клеточных культур [5,6].

В настоящей работе использовались пленки, губки и нетканые материалы из полилактида. Образцы полимерных материалов были обработаны плазмой в установке PELCO easiGlow (Ted Pella, США) (продолжительность обработки 30 и 60 минут) и сравнивались с контрольными (необработанными) образцами.

Определение морфологических особенностей матриксов проводилось методами растровой электронной микроскопии (РЭМ). Изображения были получены в РЭМ Versa 3D DualBeam и Helios NanoLab (Thermo Fisher Scientific, США).

На поверхностях всех обработанных плазмой образцов выявлено образование сетей впадин, имеющих микрометровые размеры и субмикронную глубину, причем с увеличением времени их плотность и размеры увеличиваются.

Полученные в ходе исследования РЭМ-изображения позволили увидеть эволюцию морфологии полимерных матриксов вследствие плазменной обработки, однако для численной оценки данных изменений потребовалось применить специальный метод трехмерной реконструкции поверхности по двум изображениям с РЭМ (стереопаре) на базе стереофотограмметрического подхода [7]. Трехмерная реконструкция производилась с помощью ПО Alicona MeX (Bruker Alicona, Австрия). В результате были получены полноценные трехмерные модели поверхностей образцов, что позволило подсчитать ряд количественных характеристик, в том числе площади поверхности, высоты рельефа и ряд статистических параметров, характеризующих рельеф, шероховатость, и сравнить их для модифицированных и контрольных образцов.

Для подтверждения результатов проводились также измерения удельной площади поверхности методом БЭТ (метод Брунауэра, Эммета и Теллера [8]) на анализаторе удельной поверхности и пористости Autosorb iQ (Quantachrome Instruments, США).

Таким образом, полученные в работе результаты свидетельствуют о том, что обработка плазмой способствует образованию рельефа на поверхностях всех матриксов рассматриваемых типов (пленок, губок и нетканых материалов), существенно увеличивая шероховатость их поверхности. Причем параметрами модификации поверхности возможно управлять, изменяя время воздействия плазмы на образцы. Данный результат является в особенности практически значимым для пленок: при отсутствии обработки гладкость поверхности пленок ограничивает их применение в качестве биомедицинского матрикса, а предложенный способ модификации поверхности может существенно улучшить перспективы использования пленочных матриксов для формирования искусственных органов и тканей.

Работа была проведена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-13-00321 “Деформационное поведение биоразлагаемых матриксов различного типа при механических нагрузках”).

1. Chang H-I., Wang Y. Cell responses to surface and architecture of tissue engineering scaffolds // Regenerative medicine and tissue engineering – Cells and Biomaterials. InTechOpen. 2011. DOI: 10.5772/21983
2. Narayan D., Venkatraman S.S. Effect of pore size and interpore distance on endothelial cell growth on polymers // Journal of biomedical materials research. Part A. 2008. Vol. 87(3). P. 710-718.
3. Sunami H., Yokota I., Igarashi Y. Influence of the pattern size of micropatterned scaffolds on cell morphology, proliferation, migration and F-actin expression // Biomaterials science. 2014. Vol. 2(3). P. 399-409.
4. O'Brien F.J. Biomaterials & scaffolds for tissue engineering // Materials today. 2011. Vol. 14(3). P. 88-95.
5. Davoodi A. et al. Physicochemical- and biocompatibility of oxygen and nitrogen plasma treatment using a PLA scaffold // AIP Advances. 2020. Vol. 10(12). P. 125205-1.
6. de Valence S. et al. Plasma treatment for improving cell biocompatibility of a biodegradable polymer scaffold for vascular graft applications // European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics. 2013. Vol. 85(1). P. 78-86.
7. Михуткин А.А., Васильев А.Л. Трехмерная реконструкция поверхности по изображениям, полученным в растровом электронном микроскопе // Кристаллография. 2014. Т. 59(6). С. 999–1007.
8. Брунауэр С. Адсорбция газов и паров. М.: Издательский центр «Химиздат», 1948. Т. 1. С. 783.

Компьютерное моделирование распределения температуры и размеров ванны расплава в процессе селективного лазерного сплавления

А.А. Можайко¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург

Селективное лазерное сплавление (СЛС) является одним из методов аддитивного производства, с помощью которого послойно на основе разработанной стратегии сканирования происходит сплавление порошка под действием лазерного излучения для получения конечных изделий. Одним из преимуществ аддитивного производства является возможность управления микроструктурой металлов путем изменения различных значений параметров процесса, что не может быть достигнуто традиционными технологиями изготовления металлических деталей [1].

Микроструктура образца, полученного методом СЛС, зависит от многих параметров, таких как: мощность лазера, скорость сканирования, расстояние между штриховками, длина вектора сканирования и стратегия сканирования. Для изучения влияния данных параметров на микроструктуру выгодно использовать компьютерное моделирование, так как экспериментальное получение таких зависимостей связано с проведением длительных по времени дорогостоящих экспериментов. Компьютерное моделирование позволяет сократить финансовые и временные ресурсы на выполнение исследования [2].

Однако процесс СЛС имеет сложности в моделировании из-за множества явлений, происходящих в большом диапазоне температур во время многократных процессов плавления и затвердевания. В настоящее время доступны различные численные модели СЛС. В некоторых из них оцениваются и прогнозируются размеры ванны расплава во время процесса СЛС [3], в других исследуется влияние различных параметров СЛС на распределение температуры [4].

В тоже время существующие исследования не содержат достаточной информации для прогнозирования микроструктуры образцов, изготовленных СЛС. На данный момент недостаточно изучено влияние многих параметров процесса СЛС, в частности длины вектора сканирования, на микроструктуру изготавливаемых изделий.

В этой работе рассматривается процесс моделирования для исследования влияния тепловых полей на микроструктуру образцов, изготовленных методом СЛС. Основной целью исследования является более глубокое понимание корреляции между параметрами процесса СЛС и эволюцией микроструктуры создаваемого образца. Используется трехмерный метод конечных элементов для макроскопического моделирования для оценки влияния тепловых полей на микроструктуру стали 316L. В качестве материала для моделирования процесса была выбрана аустенитная сталь 316L, так как аустенитные стали широко применяются в аддитивном производстве и не имеют фазовых переходов вплоть до температуры плавления, что упрощает задачу моделирования.

СЛС – сложный многофазный процесс, поэтому для упрощения модели было сделано несколько допущений:

- предполагается, что порошковый материал представляет собой сплошную среду;
- коэффициент поглощения энергии лазера постоянен;
- динамические процессы при плавлении и испарении не учитываются.

Была разработана модель селективного лазерного сплавления, с помощью которой можно получить распределение температур в любой момент времени в течение всего рассмотренного процесса сплавления во всем объеме образца. На основе полученных распределений температур были рассчитаны зависимости размеров ванны расплава от длины вектора сканирования.

Установлено, что уменьшение длины вектора сканирования приводит к увеличению глубины ванны расплава и к более глубокому проникновению ванны расплава в предыдущие слои. Рост зерна происходит из ранее нанесенного слоя, который частично переплавляется. Эти условия способствуют увеличению степени удлинения зерен, более выраженному эпитаксиальному росту и, следовательно, усилению морфологической и кристаллографической текстуры.

Полученные результаты наглядно демонстрируют возможность управления микроструктурой образцов с помощью параметров процесса СЛС. С помощью разработанной модели можно выбрать оптимальные параметры процесса СЛС и изготавливать более качественные детали для широкого спектра областей (судостроение, авиастроение, двигателестроение, инструментальное производство, автомобилестроение, химическая и нефтяная промышленность и др.).

1. Liu J., To A.C. Quantitative texture prediction of epitaxial columnar grains in additive manufacturing using selective laser melting // Additive Manufacturing. 2017. N 16. С. 58-64.
2. Kuznetsov P.A., Shakirov I.V., Mozhayko A.A., Zhukov A.C., Bobyr V.V. Comparison of sequential and circular scanning thermal fields and their influence on microstructure of Alnico alloy produced by laser powder bed fusion // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. N 1967. С. 012064.
3. Krakhmalev P., Yadroitsava I., Fredriksson G., Yadroitsev I. In situ heat treatment in selective laser melted martensitic AISI 420 stainless steels // Materials & Design. 2016. N 87. С. 380-385.
4. Antony K., Arivazhagan N., Senthilkumaran K. Numerical and experimental investigations on laser melting of stainless steel 316L metal powders // Journal of Manufacturing Processes. 2014. N 26. С. 345-355.

Влияние Ga на фазовые превращения и свойства ферромагнитной фазы в системе Mn-Al

Т.А. Морозова¹, М.В. Горшенков¹, А.С. Фортуна¹

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

В настоящий момент наиболее широко применяемыми магнитотвердыми материалами являются две группы: сплавы на основе редкоземельных металлов (РЗМ) и ферриты. Ферриты характеризуются невысокими магнитными свойствами, но при этом довольно дешевы в производстве. Группа на основе РЗМ, наоборот, имеет высокие магнитные характеристики, и высокую стоимость как компонентов, так и изготовления. В этой связи появился большой интерес к относительно дешевым магнитам, не содержащим РЗМ, на основе системы Mn-Al. Эти сплавы обладают высокой константой магнитокристаллической анизотропии, а также теоретически возможным магнитным произведением около 100 КДж/м³ [1]. Ферромагнетизм Mn-Al сплавов связан с образованием ферромагнитной τ -фазы со структурным типом L1₀. Получение τ -фазы возможно путем охлаждения с промежуточной скоростью (≈ 10 °C/c) из высокотемпературной области ϵ -фазы либо путем закалки из той же области с последующим отжигом в диапазоне температур 300-500°C. Однако магнитная τ -фаза является метастабильной и при высоких температурах (≈ 680 °C и более) разлагается на равновесные фазы γ_2 и β (Mn). Повышение термодинамической стабильности ферромагнитной τ -фазы является крайне актуальной задачей, которую можно решать путем легирования.

В системе Mn-Ga также имеется ферромагнитная τ -фаза со структурным типом L1₀, имеющая близкие параметры решётки. Однако, в отличие от системы Mn-Al, τ -фаза в Mn-Ga является термодинамически стабильной. В связи с высокой стоимостью галлия и невысокими собственными магнитными характеристиками привлекательной является тройная система Mn-Al-Ga. В этой связи целью данной работы являлось исследование влияния Ga на фазовые превращения и магнитные свойства ферромагнитных сплавов системы Mn-Al.

В работе методом электродуговой плавки был получен сплав состава Mn₅₅Al₃₆Ga₉. После гомогенизирующего отжига и охлаждения с контролируемой скоростью в сплаве наблюдалось образование τ - и γ_2 -фаз различного состава. Сплавы составов Mn_{54,4}Al_{36,8}Ga_{8,8} и Mn_{58,8}Al_{33,8}Ga_{7,4}, соответствующие составам образовавшихся фаз (τ и γ_2), были выплавлены для изучения процессов фазовых превращений. Анализ сплавов проводился с использованием рентгеноструктурного анализа, дифференциальной сканирующей калориметрии и растровой электронной микроскопии (РЭМ). Температура Кюри была определена по термомагнитным кривым, полученных с использованием вибромагнетометра.

После термообработки сплав Mn_{58,8}Al_{33,8}Ga_{7,4} состоял из одной метастабильной τ -фазы. Температура Кюри фазы данного состава была 377 °C, что всего на 3 °C меньше, чем для чистого сплава Mn-Al. В сплаве Mn_{54,4}Al_{36,8}Ga_{8,8} после термообработки были сформированы две магнитные τ -фазы. Это продемонстрировали термомагнитные кривые: для данного сплава наблюдались две температуры Кюри ($T_{c1}=302$ °C, $T_{c2}=347$ °C), которые значительно ниже, чем у первого сплава со структурой одной метастабильной τ -фазы. Таким образом, в работе была подтверждена возможность образования двух ферромагнитных τ -фаз, которые представляют собой метастабильную τ -фазу, как в системе Mn-Al, и более стабильную τ -фазу, как в системе Mn-Ga [2]. Первая образуется из высокотемпературной ϵ -фазы, вторая в ходе дополнительного отжига из равновесной γ_2 -фазы. Превращение $\gamma_2 \rightarrow \tau$ протекает по механизму массивного превращения, так как области новой τ -фазы образуются на границах зёрен γ_2 - и τ -фаз. На рентгенограмме в сплаве состава Mn_{54,4}Al_{36,8}Ga_{8,8} наблюдается небольшое расщепление линии (110), которое, с учётом дублетного расщепления, лучше описывается двумя магнитными фазами, чем одной, что подтверждает результаты исследования на вибромагнетометре.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (РНФ), проект № 18-73-10219.

1. Coey J.M.D. Permanent magnets: Plugging the gap // Scripta Materialia. – 2012. – V. 67 – P. 524-529.
2. Alloying with a few atomic percent of Ga makes MnAl thermodynamically stable / T. Mix, F. Bittner, K.-H. Müller et al. // Acta Materialia. – 2017. – V128. – P. 160 – 165.

Обработка технологии создания высокоэффективных магнитоэкранирующих конструкций на основе аморфных и нанокристаллических сплавов системы Co-Ni-Fe-Cr-Si-B

Мухамедзянова Л.В.

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

В НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» ведётся разработка и совершенствование опытно-промышленной технологии получения магнитоэкранирующих материалов и создание различных конструкций на их основе с использованием аморфных и нанокристаллических магнитомягких сплавов, по своим магнитным и эксплуатационным характеристикам превосходящим традиционные аналоги из сплавов пермаллового класса [1, 2].

Наиболее производительным и экономически выгодным способом получения промышленных объёмов аморфных магнитомягких сплавов является спиннингование из расплава, в результате чего получается лента толщиной до 30 мкм, которая не успевает закристаллизоваться благодаря сверхвысоким скоростям охлаждения. Последующая термическая обработка приводит к снятию высоких закалочных напряжений, возникающих в результате таких скоростей охлаждения, и релаксации аморфной структуры, что позволяет на порядок повысить магнитную проницаемость аморфной ленты и соответственно эффективность экранов на её основе.

Однако при получении ленты могут возникать различные неоднородности по составу и структуре из-за различных изменений технологического режима, что приводит к снижению эффективности получения годного к дальнейшему использованию материала.

Объектом исследования является сплав АМАГ-172 системы Co-Ni-Fe-Cr-Si-B с близкой к нулю магнитострикцией насыщения, что позволяет получать достаточно высокие магнитные свойства.

Для обеспечения близкой к нулю магнитострикции необходимо оптимально подбирать соотношение входящих в состав сплава элементов, так как данное свойство определяется преимущественно химическим составом сплава. Путем варьирования соотношения кобальта и никеля можно добиться значения нулевой магнитострикции насыщения и, как следствие, сформировать высокие магнитные свойства сплава для создания эффективных магнитных экранов.

На практике часто химический состав поставляемых лент не совпадает с заявляемым и различие бывает довольно существенным. Содержание этих элементов с достаточной высокой точностью определяется методом рентгено-флуоресцентной спектроскопии, в связи с чем он был выбран для входного контроля лент.

Одним из самых простых и эффективных способов повышения магнитных свойств аморфных сплавов является термическая обработка на воздухе.

В ходе работы оптимизирована технология термической обработки аморфных магнитомягких сплавов на основе кобальта, подобран режим для получения наибольших значений максимальной магнитной проницаемости, необходимой при создании эффективных магнитных экранов. На основе экспериментальных данных показана возможность получения высокой магнитной проницаемости порядка 10^6 в исследуемых сплавах при отжиге на 300-400 °C и длительности изотермической выдержки 10-30 минут. При такой термообработке сплав остается рентгеноаморфным, тем не менее в структуре существовали и происходит образование новых упорядоченных нанокристаллических областей размерами 6-10 нм преимущественно на поверхности [3]. Коэффициент экранирования изготовленного из термообработанных лент магнитного экрана достигает 1500.

Однако создание различных конструкций на основе полученного экранирующего материала неизбежно влечет за собой возникновение упругих напряжений при их изгибе и перегибе, что существенно снижает магнитную проницаемость сплава, а, следовательно, эффективность экранирования. Но в отличие от аналогов пермаллового класса эти изменения являются обратимыми [4]. В процессе работы проанализированы изменения магнитных свойств при действии упругой деформации после рассмотренных режимов термической обработки и их обратимость при снятии упругих напряжений. Показано, что для получения максимального коэффициента экранирования, термообработку лент необходимо производить в том же механическом состоянии, в котором они будут находиться в экране. Для получения достоверных результатов при численном расчете коэффициента экранирования необходимо использовать кривые намагничивания, измеренные для лент в том же механическом состоянии, в котором они находятся в экране.

1. Песков Т.В., Шавыкин М.А., Фармаковский Б.В., Васильева О.В., Маренников Н.В., Бутусова Т.Ю., Галяткина Л.В., Кузнецов П.А. Экранированный бокс с защищенным от внешнего электромагнитного воздействия внутренним объемом // Патент на изобретение RU 2402892 C1, 27.10.2010. Заявка № 2009142621/07 от 18.11.2009.
2. Песков Т.В., Шавыкин М.А., Фармаковский Б.В., Васильева О.В., Бутусова Т.Ю., Галяткина Л.В., Кузнецов П.А. Силовой кабель с электромагнитным экраном // Патент на изобретение RU 2444075 C2, 27.02.2012. Заявка № 2009142622/07 от 18.11.2009.
3. Гойхенберг Ю.Н., Рощин В.Е., Ильин С.И. Структура и магнитные свойства аморфных сплавов в зависимости от степени кристаллизации // Вестник ЮУрГУ, № 14, 2011
4. Кузнецов П.А., Маннинен С. А., Васильева О.В., Влияние упругих изгибных деформаций на магнитные и экранирующие свойства магнитного экрана // Вопросы материаловедения №4, 2011, с. 67-72.

Эффективность применения различных технологических процедур при выращивании усталостной трещины

Е.Д.Назарова¹, И.А.Гальчун²

^{1,2} НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

Интенсивное развитие современной техники сопровождается повышением требований к используемым материалам. Одним из таких параметров является трещиностойкость. Для испытания образцов на трещиностойкость по существующим стандартам в образцах выполняется выращивание усталостных трещин, к которым предъявляется ряд требований, в том числе фронт усталостной трещины должен быть прямолинейным, что достигается не всегда в силу различных факторов. Криволинейность выращенной усталостной трещины вносит нежелательную неопределённость в определяемые значения параметров [1]. Задача получения корректной (более прямолинейной) формы фронта усталостной трещины, поставленная еще в 20 веке, до сих пор решается качественными методами. Действующий ГОСТ 25.506 по определению характеристик трещиностойкости (вязкости разрушения) при статическом нагружении не позволяет решить рассматриваемую проблему.

Испытания на трещиностойкость проводят в том числе и по известным международным стандартам ISO 12135 [2] (для основного металла) и ISO 15653 [3] (для металла сварных соединений). Очевидно, что для сварных соединений из-за наличия остаточных сварочных напряжений достижение прямолинейности трещины затруднено. По этой причине в стандарте ISO 15653 представлен ряд специальных технологических мероприятий. В то же время для основного металла в стандарте ISO 12135 проведение таких мероприятий не предусмотрено. Однако прокат современных марок низкоуглеродистых сталей, производимый по технологии термомеханической обработки, в состоянии поставки имеет внутренние остаточные напряжения (ОН), что приводит к неравномерному росту трещины по толщине образца и, соответственно, недопустимой кривизне её фронта.

Для решения поставленной задачи по выравниванию фронта усталостной трещины были рассмотрены 4 различных варианта предварительной обработки образцов: локальное боковое обжатие, предварительное нагружение обратным знаком, циклическое нагружение при повышенной асимметрии цикла, предварительная вибрационная обработка.

В ходе расчетов МКЭ было показано, что когда локальное боковое обжатие выполняется после изготовления надреза, повышение степени обжатия (уменьшением толщины образца) свыше 0,5% приводит к «насыщению», далее поле остаточных напряжений не меняется. Наиболее равномерное распределение ОН достигается при обжатии с уменьшением толщины образца на 0,2-0,4% [4]. Когда локальное боковое обжатие выполняется до изготовления надреза, «насыщение» не достигается. Наиболее равномерное распределение ОН достигается при обжатии с уменьшением толщины образца на 0,5%. Расчетами показано, что в обоих случаях исходное поле ОН в образце полностью заменяется на поле после обжатия, таким образом обеспечивается предсказуемая форма усталостной трещины. После проведенных расчетов была выполнена экспериментальная проверка применения различных вариантов обжатия. Ранее полученные результаты экспериментально подтвердились. Впервые на ряде сварных образцов получен практически необходимый прямолинейный фронт выращенной усталостной трещины.

Предварительное статическое нагружение обратным знаком приводит к созданию локального поля растягивающих остаточных напряжений у дна надреза, что позволяет усталостной трещине стартовать по всему фронту. Применение такой процедуры слабо влияет на дальнейший рост усталостной трещины, но для коротких трещин этого может быть достаточно, чтобы обеспечить необходимую прямолинейность фронта усталостной трещины.

Также применяется изменение асимметрии циклического нагружения R (отношение минимальной нагрузки цикла к максимальной) при выращивании трещины, которое предусмотрено в стандарте ISO 15653 только для сварных образцов. В этом стандарте (приложение С.4) отмечено, что увеличение коэффициента асимметрии цикла может привести к завышению получаемых результатов, но в то же время выравнивает форму трещины. Во время испытаний данное замечание не подтвердилось и полученные результаты не были завышены. Данный факт свидетельствует о том, что для исследуемого материала подобную технологию выращивания трещины можно применять не опасаясь завышенных результатов.

Поскольку для образцов основного металла боковое обжатие стандартами не предусмотрено, прямолинейный фронт трещины может быть достигнут с применением предварительного нагружения обратным знаком и повышенной до $R=0.7$ асимметрии циклического нагружения при её выращивании. Вибрационная обработка на 1 млн. циклов не дает никаких изменений поля ОН, форма фронта усталостной трещины остаётся такой же, как без применения виброобработки. Это было показано экспериментально.

Экспериментальные исследования выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Состав, структура и свойства конструкционных и функциональных материалов» НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования – соглашение № 13.ЦКП.21.0014 (075-11-2021-068). Уникальный идентификационный номер – RF-2296.61321X0014.ЦНИИ КМ

1. Матвиенко, Ю.Г. Модели и критерии механики разрушения. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 328 с.
2. ISO 12135-2016 Metallic materials — Unified method of test for the determination of quasistatic fracture toughness. Second Edition. ISO, 2016. - 106p.
3. ISO 15653-2018 Metallic materials — Method of test for the determination of quasistatic fracture toughness of welds. Second edition. ISO, 2018 - 54p.
4. К.Е.Садкин, В.Ю.Филин, А.В.Мизецкий, Е.Д.Назарова, Оценка методом конечных элементов эффективности локального бокового обжатия призматических образцов с надрезом, научно-технический журнал «Вопросы материаловедения» № 4 (104), г. Санкт-Петербург, 2020, С.182-191.

Сравнительные исследования механических свойств и структуры толстолистого проката из низкоуглеродистых низколегированных сталей

В.Р. Никитина¹, О.В. Сыч¹, Г.Д. Мотовилина¹

1 - НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург

В последние годы в мире стремительно растет потребность в создании крупномасштабных сварных конструкций, нефтеперерабатывающих и нефтедобывающих платформ, а также башен ветроэнергетических установок, эксплуатирующихся в условиях Арктики. Для строительства данных сооружений используется прокат толщиной до 100 мм, обладающий высокой прочностью и хладостойкостью. Наиболее востребованным материалом для их строительства остаются низкоуглеродистые низколегированные стали с гарантированным пределом текучести 355-460 МПа.

Известно, что для получения высоких свойств хладостойкости в металлопрокате из низкоуглеродистой низколегированной стали должна быть сформирована мелкодисперсная однородная структура, состоящая преимущественно из смеси гранулярного бейнита и феррита. Для этого необходимо осуществить правильный подбор легирующих элементов и термомеханической обработки.

Для толстолистого проката из низкоуглеродистых низколегированных сталей, полученного после термомеханической обработки, должны выполняться комплексные требования к параметрам структуры по анизотропии [1, 2], морфологии, дисперсности, соотношению структурных составляющих, объемной доле и размерам областей бейнита реечной морфологии [3, 4]. Однако при его изготовлении возникают трудности из-за особенности распределения температурно-деформационного градиента в листах большой толщины, а, соответственно, и со сложностью обеспечения структурной однородности и изотропности механических свойств [5-7].

Поэтому поиск взаимосвязи между механическими свойствами и параметрами структуры по толщине листового проката остается актуальным направлением исследований. В связи с этим в работе объектом исследования являлся листовой прокат толщиной 25, 50 и 100 мм с гарантированным пределом текучести 420 МПа из низкоуглеродистой низколегированной стали с ферритно-бейнитной структурой.

Цель работы заключалась в определении взаимосвязи структуры и механических свойств по толщине листового проката до 100 мм из низкоуглеродистой низколегированной стали с гарантированным пределом текучести 420 МПа.

Проведены испытания на растяжение и ударный изгиб образцов, отобранных от поверхности, $\frac{1}{4}$ и $\frac{1}{2}$ по толщине листового проката, а также исследованы структуры и изломы ударных образцов. В результате проделанной работы была выявлена структурная неоднородность, как по размерным, так и по морфологическим параметрам. В результате фрактографического исследования причиной разрушения были выявлены сколы и квазисколы, обусловленные наличием крупных зерен феррита и областей реечного и гранулярного бейнита размером более 18 мкм.

Показано, что с увеличением толщины листового проката наблюдается более значительный разброс прочностных характеристик (в листовом прокате 25 мм $\Delta\sigma_{0.2}$ составляет не более 11 МПа, в листовом прокате 100 мм – не более 84 МПа). Это связано с увеличением степени неоднородности структуры по толщине (по размерам и морфологии структурных составляющих феррита, реечного и гранулярного бейнита) и более интенсивным развитием процессов самоотпуска в α -фазе бейнита реечной морфологии. Установлено, что совокупность роста геометрических и количественных параметров реечного бейнита приводит к снижению работы удара при отрицательных температурах.

Проведено имитационное моделирование различных режимов термомеханической обработки на dilatометре DIL805 A/D и выбраны оптимальные режимы черновой и чистовой стадии прокатки, обеспечивающие формирование наиболее благоприятной однородной бейнитной структуры с бейнитом преимущественно гранулярной морфологии в листах толщиной 25 мм и ферритно-бейнитной структуры с квазиполигональным ферритом и гранулярным бейнитом в листах толщиной 50 мм.

1. Thridandapani R.R., Misra R.D.K., Mannering T., Panda D., Jansto S. The application of stereological analysis in understanding differences in toughness of V- and Nb-microalloyed steels of similar yield strength // Mater. Sci. Eng. A. – 2006. – Pp. 285-291.
2. Hu J., Du L.X., Zang M., Yin S.J., Wang Y.G., Qi X.Y., Gao X.H., Misra R.D.K. On the determining role of acicular ferrite in V-N microalloyed steel in increasing strength-toughness combination // Materials Characterization. – 2016. – Vol. 118. – Pp. 446-453.
3. Настич С.Ю. Влияние морфологии бейнитной составляющей микроструктуры низколегированной стали X70 на хладостойкость проката больших толщин // Металлург. – 2012. – № 3. – С. 62-69.
4. Isasti N., Jorge-Badiola D., Taheri M.L., Uranga P. Microstructural Features Controlling Mechanical Properties in Nb-Mo Microalloyed Steels. Part II: Impact Toughness // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2014. – Vol. 45. – Pp. 4972–4982.
5. Е. А. Голи-Оглу, Ю. А. Бокачев. Термомеханическая обработка плит толщиной до 100 мм из низколегированной конструкционной стали в NLMK DanSteel // Сталь №9, 2014. – С. 71-78.
6. Е. А. Голи-Оглу. Обеспечение повышенной хладостойкости плит FH40 толщиной 70-100 мм для морских конструкций северного исполнения // Металлург №6, 2015. – С. 53-58.
7. М.А. Смирнов, И.Ю. Пышминцов, А.Н. Мальцева, О.В. Мушина. Влияние ферритно-бейнитной структуры на свойства высокопрочной трубной стали // Металлург №1, 2012. – С. 55-62.

Применение метода рентгеновской дифрактометрии для выявления непровара в стыковых сварных соединениях после сварки трением с перемешиванием

В.Е. Никитин¹, Н.Н. Баракшина¹, Е.А. Алифиренко¹, С.В. Косьяненко^{2,3}

¹«НИЦ «Курчатовский институт – ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург

²«НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ», г. Гатчина

³ООО «Радиационные диагностические технологии», г. Гатчина

Перспективный метод сварки трением с перемешиванием (СТП) является эффективным способом получения высококачественных соединений конструкций различной геометрии [1-3], включая листовые материалы, пространственные профильные конструкции, а также трубопроводы и сосуды под давлением [4-6]. СТП также применяется для восстановления изношенных деталей [1,7], модифицирования структуры, «залечивания» трещин и литейных дефектов [8,9]. СТП становится универсальной технологией, имеющей большие перспективы в судостроительной, авиационной, аэрокосмической и автомобильной отраслях производства [1] и может быть применена в качестве альтернативы заклепочным соединениям, контактной, электродуговой, электроннолучевой и лазерной сваркам.

Так как сварка происходит в твердой фазе, процесс СТП, имеет следующие преимущества в сравнении со сваркой плавлением: высокая прочность сварного соединения, низкий уровень остаточных деформаций и напряжений; отсутствие дефектов, свойственных сварке плавлением; сварка материалов, которые не предназначены для сварки плавлением.

Однако, как и при любом процессе интенсивной пластической деформации, к СТП предъявляются особые требования к технологической оснастке и контролю качества сварных соединений. Это обусловлено тем, что при СТП типы и размеры дефектов радикальным образом отличаются от дефектов, возникающих при сварке плавлением. Так в результате отклонения режимов технологии СТП, износа сварочного инструмента, некачественной подготовки кромок в корне шва могут возникать непровары, ширина которых на порядок меньше дефектов в сварных соединениях, выполненных сваркой плавлением.

Поэтому существующие стандартные методы неразрушающего контроля (визуальный, проникающий, радиографический, ультразвуковой) нечувствительны при выявлении непровара в сварных СТП-соединениях. Вихреговой контроль, примененный для СТП в [10], также не показал наличие дефекта на контрольных образцах. Современные ультразвуковые способы выявления дефектов [11], включая методы дифракционно-временного (TOFD) и фазированных решеток, неприменимы при работе на толщинах менее 4 мм.

В настоящее время для получения качественных и бездефектных сварных соединений разрабатываются особые требования к производителям установок СТП, методикам подготовки поверхности свариваемого материала, аттестации и проверки квалификации оператора сварки, контролю качества сварных соединений [12].

В данной работе для выявления непровара в СТП-швах предложен метод рентгеновской дифракции. Данный метод показал положительный опыт применения при определении остаточных сварочных напряжений в СТП-соединениях [13]. Метод рентгеновской дифракции позволяет определить изменения в структуре материала, которые могут свидетельствовать о наличии непровара в корне шва СТП. Для решения этой задачи из алюминиевого сплава 1561 были изготовлены сварные пробы размером 500x300x3 мм для моделирования условий образования непровара в корне шва.

Выявление непровара методом рентгеновской дифракции проводили при съемке поликристаллов в параллельном пучке монохроматического излучения с применением портативного рентгеновского двухлучевого кристалл-дифракционного анализатора «HePKA» (г. Гатчина, ООО «РадиаТех»). На дифракционной картине определяли угол дифракции 2θ линии Сг, близкий к 180° , ширину и интегральную интенсивность дифракционного пика.

Показано, что интегральная интенсивность дифрагированного излучения имеет линейную корреляцию с погружением сварочного инструмента при СТП. Было получено, что интенсивность рефлексов при рентгеновской дифракции заметно возрастала на образцах без дефектов. Это связано с особенностями формирования структуры металла шва в процессе СТП. Было установлено, что непровар в шве СТП характеризуется наличием в корневой зоне пластически деформированных вытянутых зёрен. Тогда как в пробах без непровара в корне шва преобладает измельченная структура равноосных зёрен. Полученные результаты подтверждены исследованиями металлографии и испытаниями образцов на статический изгиб.

1. Алифиренко Е.А., Шишенин Е.А. Перспективы снижения веса корпусных и надстроечных конструкций при использовании сварных крупногабаритных облегченных панелей, полученных методом сварки трением с перемешиванием / Труды Крыловского государственного научного центра. Специальный выпуск 1, 2019, с. 49-52.
2. Arbegast W.J. Application of Friction Stir Welding and Related Technologies. Friction stir WChapter 13, 2007, 273-308 pp.
3. Наумов А.А., Ожегов М.А., Смелянский Р.И., А. Алали Алхалаф, Поляков П.Ю. Физико-механические процессы соединения тонких листов алюминия при сварке трением с перемешиванием встык // Материаловедение. Энергетика. 2020. Т. 26, № 2. С. 88–102.
4. Dalder E., Pastrnak J.W., Engel J., Forrest R.S., Kokko E., McTernan K., Waldron D. Friction stir welding of thick-walled aluminum pressure vessels. Welding Journal (Miami, Fla), Vol. 87 (4), 2008, 40-44 pp.
5. Cater S., Martin J. Developments in friction stir welding for LNG shipping. RINA, Royal Institution of Naval Architects - Design and Construction of LNG Ships 2016, 131 – 136 pp.
6. Дриц А.М., Овчинников В.В., Башаев В.А. Механические свойства соединений плит сплава АД0 при аргонодуговой сварке и сварке трением с перемешиванием / Цветные металлы, 12, 2018, с. 82-87.
7. McNelley T., Oh-Ishi Keiichiro, Zhilyaev A. Microstructures and Properties of Copper Alloys after Friction Stir Welding/Processing. Friction Stir Welding and Processing, 2007, 155-173 pp.
8. Morozova, I., Obrosov, A., Naumov, and others. Impact of Impulses on Microstructural Evolution and Mechanical Performance of Al-Mg-Si Alloy Joined by Impulse Friction Stir Welding. Materials 2021, 14, 347.
9. Gegeky, M., Liou, F., Newkirk, J. Proposed Hybrid Processes for Part Building Using Fusion Welding and Friction Stir Processing, Solid Freeform Fabrication 2016: Proceedings of the 27th Annual International Solid Freeform Fabrication Symposium - An Additive Manufacturing Conference, 2016, 1237-1258 pp.
10. Santos T.S., Vilaça P., Quintino L. Developments in NDT for Detecting Imperfections in Friction Stir Welds in Aluminium Alloy / Welding in the World 52(9-10), 2013, 1-10 pp.
11. Tabatabaeipour M., Hettler J, Delrue S, Van Den Abeele K. Non-destructive ultrasonic examination of root defects in friction stir welded butt-joints / NDT&E International, 80, 2016. 23-34 pp.
12. American Bureau of Shipping “ABS Guide for the Approval of Friction Stir Welding in Aluminum, 2011”, p.14.
13. Pengfei Ji., Zhongyu Yang., Jin Zhang., Lin Zheng., Vincent Ji., Vincent Klosek. Residual stress distribution and microstructure in the friction stir weld of 7075 aluminum alloy / Journal of Materials Science, 50, 2015, 7262-7270 pp.

Изотермическое изменение деформации сплава $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{41.8}Cu_8$ при образовании ориентированного мартенсита

Пчельников П.А.¹, Демидова Е.С.¹, Беляев С.П.¹, Реснина Н.Н.¹, Шеляков А.В.²

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

²Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ» (Московский инженерно-физический институт), Москва, Россия

Сплавы с эффектом памяти формы представляют собой сплавы, которые могут восстанавливать неупругие деформации при нагревании (эффект памяти формы) или разгрузке (эффект псевдоупругости) [1]. Такое поведение обусловлено мартенситными превращениями - фазовыми переходами первого рода, происходящими в данных сплавах при изменении температуры или нагрузки. В случае, когда эти превращения происходят под действием нагрузки, мартенситная (низкотемпературная) фаза становится ориентированной по направлению нагрузки, что приводит к появлению деформации, которая полностью восстанавливается при реализации обратного перехода.

К настоящему моменту обнаружено, что в ряде сплавов с эффектом памяти формы на основе TiNi возможно изотермическое образование мартенситной фазы [2]. Более того, показано, что при изотермической выдержке после охлаждения под нагрузкой изотермическое мартенситное превращение сопровождается изменением обратимой деформации [3]. Однако остается неизвестным, будет ли изотермическое превращение после активного нагружения (т.е. в режиме псевдоупругости) сопровождаться изменением обратимой деформации. В связи с этим целью настоящей работы явилось исследование изменения обратимой деформации при изотермическом образовании ориентированного мартенсита после нагружения в различных режимах.

В качестве объекта исследования был выбран сплав $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{41.8}Cu_8$, в котором ранее наблюдали изотермическое образование мартенситной фазы. Для изучения изотермического изменения обратимой деформации проводили 2 серии экспериментов. В первой серии образец нагружали до 240 МПа при температуре выдержки до появления неупругой деформации (т.е. до начала образования ориентированного мартенсита), выдерживали в течение часа, после чего разгружали и нагревали. Во второй серии экспериментов образец под постоянной нагрузкой, равной 240 МПа, охлаждали до температуры выдержки, выдерживали в течение часа, после чего нагревали. Температуру выдержки выбирали внутри температурного интервала прямого перехода под нагрузкой.

Полученные результаты показали, что в условиях изотермической выдержки сплава $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{41.8}Cu_8$ вне зависимости от режима нагружения происходило увеличение обратимой деформации, которая полностью восстанавливалась при последующем нагревании. В случае активного нагружения максимальное изотермическое изменение обратимой деформации 3,8% наблюдали при температуре 75 °С. В случае охлаждения под нагрузкой максимальное изменение обратимой деформации составило 3,2% и было достигнуто при температуре 40 °С. Таким образом, можно заключить, что в сплаве $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{41.8}Cu_8$ изотермическое образование ориентированного мартенсита сопровождается изменением обратимой деформации. При этом максимальная величина изотермической деформации и условия ее достижения зависят от способа нагружения материала.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 18-19-00226).

1. K. Otsuka, X. Ren. Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys // Progress in Materials Science 50 (2005) 511–678.
2. S. Kustov, D. Salas, E. Cesari, R. Santamarta, J. Van Humbeeck. Isothermal and athermal martensitic transformations in Ni–Ti shape memory alloys // Acta Materialia 60 (2012) 2578–2592.
3. Demidova E. Strain variation during the isothermal martensitic transformation in $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{41.8}Cu_8$ alloy // Materials Letters 254 (2019) 266.

Оптимизация конструктивно-технологического исполнения монтажных сварных соединений блоков корпусов транспортных АЭУ

Самойленко Р. И., Тимофеев М. Н.

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

Доклад относится к вопросу повышения прочностных свойств металла «силовых» малоуглеродистых наплавов до уровня требуемых значений и стойкости против хрупких разрушений металла «силовых малоуглеродистых наплавов» [1-10].

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. Тимофеев М. Н., Карзов Г. П., Галяткин С. Н. и др. Повышение служебных характеристик металла монтажных сварных соединений транспортных атомных энергетических установок из теплоустойчивых сталей. Часть 1: Технология сварки теплоустойчивых сталей углеродистыми сварочными материалами в условиях отсутствия термической обработки и опыт применения сварочных материалов / Вопросы материаловедения. –2017. № 4 (92). С. 131-139.
2. Тимофеев М. Н., Галяткин С. Н., Михалева Э. И. и др. Повышение служебных характеристик металла монтажных сварных соединений транспортных атомных энергетических установок из теплоустойчивых сталей. Часть 2. Исследование механических свойств металла «силовых» малоуглеродистых наплавов в зависимости от технологических параметров сварки / Вопросы материаловедения. –2017. № 4 (92). С. 140-148.
3. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Сварка и наплавка оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок (НП-104-18). – М., Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору, 2018. 260 с.
4. Кархин В. А. Тепловые основы сварки: Учебное пособие. – Л., 1990. – 99 с.
5. Барахтин Б. К. Металлы и сплавы. Анализ и исследование. Физико-аналитические методы исследования металлов и сплавов. Неметаллические включения: Справочник / Б. К. Барахтин, А. М. Немец. – СПб: НПО «Профессионал», 2006. 490 с.
6. Карзов Г. П., Теплухина И. В., Богданов В. И. и др. Опыт производства крупногабаритных заготовок из стали 15Х2МФА-А модификация А для корпуса реактора Курской АЭС-2 по проекту ВВЭР-ТОИ / Проблемы черной металлургии и материаловедения. – 2019. №3. С. 27-36.
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.
8. Матросов М. Ю., Лясоцкий И. В., Кичкина А. А. и др. Особенности и классификация структур низкоуглеродистых низколегированных высокопрочных сталей // Сталь. – 2012. №1. С. 65-74.
9. Коберник Н. В., Чернышов Г. Г., Гвоздев П. П., Линник А. А. Влияние рода и полярности тока на плавление электродного и основного металла при сварке под флюсом // Сварка и диагностика. – 2011. №5. С. 24-27.
10. Тимофеев М. Н., Галяткин С. Н. Особенности применения переменного тока при автоматической сварке под флюсом оборудования АЭУ из теплоустойчивых сталей // Сварочное производство. – 2019. №8. С. 22-28.

Принципы создания износостойких антиобледенительных покрытий

Л.В. Соловьянчик, В.С. Ведникова, А.А. Мельников

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации, г. Москва

Обледенение элементов конструкций авиационной техники, строительных сооружений, ветрогенераторов и пр. является одной из важнейших проблем в различных отраслях промышленности [1–3]. Поскольку использование существующих противобледенительных систем и составов с кратковременным эффектом не позволяет полностью предотвратить обледенение, актуальной задачей современного материаловедения является разработка износостойких антиобледенительных покрытий.

В работе исследована возможность применения в качестве антиобледенительной защиты различных типов модифицированных полимерных покрытий: высокогидрофобных покрытий на основе фторопласта с углеродными нанотрубками (УНТ), покрытий на основе полиуретановых эластомеров и покрытий на основе органогеля.

Для придания поверхности покрытий на основе фторопласта высокогидрофобной шероховатой текстуры были использованы нативные нанотрубки марки «Таунит-МД» и функционализированные алкильными группами УНТ марки «Таунит-М».

Общей тенденцией формирования рельефа исследуемых образцов является переход от «холмообразных» структур к «сотообразным» при увеличении концентрации УНТ в матрице. Поверхность образцов представляет из себя агломераты из углеродных нанотрубок, покрытых слоем полимера. При увеличении концентрации наночастиц УНТ образуют нанорельеф поверхности, что позволяет придавать материалу высокогидрофобные и водоотталкивающие свойства.

При проведении исследований времени замерзания капель на поверхности покрытия методом одновременной съемки в видимом и тепловизионном ИК диапазонах было установлено, что исследуемые образцы позволяют обеспечить задержку времени замерзания капли на поверхности практически в 2 раза.

Однако, при понижении температуры исследуемые покрытия теряют свои водоотталкивающие свойства, кроме того, адгезия льда к их поверхности составляет 200–400 кПа, что значительно превышает величину адгезии, необходимую для самоочистки поверхности от льда (менее 100 кПа [4, 5]).

Приняв во внимание результаты исследований иностранных авторов, посвященных процессам разрушения клеевых соединений, согласно которым сила, необходимая для отрыва намного ниже в случае деформируемых материалов, чем недеформируемых [6] в настоящей работе были исследованы покрытия на основе полиуретановых эластомеров, дополнительно модифицированных УНТ.

Поскольку исследуемые покрытия являются гидрофильными (угол смачивания от 47,4 до 67,6 °), изменение гидрофобных параметров не позволяет объяснить существенного снижения величины адгезии льда к поверхности (от 40 до 210 кПа). Однако, по результатам проведенных исследований установлена корреляция между адгезией льда и модулем сдвига.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что для получения покрытий с минимальной адгезией льда необходимо использование полимерных матриц с малым значением модуля сдвига при отрицательных температурах.

Как показывает практика иностранных ученых использование в составе покрытий лубриканта, незамерзающего при минусовых температурах, позволяет существенно снизить адгезию льда к поверхности [6], однако данные системы не являются износостойкими.

Дальнейшие исследования в настоящей работе проводились на покрытиях на основе кремнийорганической матрицы, в которую дополнительно вводили полиметилсилоксан ПМС-200, а для повышения физико-механических характеристик покрытий были использованы наночастицы ВС-100.

При использовании различного соотношения компонентов удалось достичь рекордно низкой величины адгезии льда 16,5 кПа при высокой стойкости покрытия к истиранию (индекс Табера – 7,5), сохранив высокогидрофобные и водоотталкивающие свойства поверхности.

Образцы покрытия, обладающего наилучшими с точки зрения антиобледенительной защиты характеристиками, были подвержены ряду испытаний, моделирующих эксплуатационные (воздействие повышенных температур, ультрафиолетового излучения, тепловлаги и термоциклирования). В результате проведенных исследований установлено, что данные факторы не оказывают существенного влияния на свойства исследуемых образцов.

Таким образом, полученные в данной работе результаты являются перспективными для получения стойких к воздействию внешних факторов покрытий с пониженной адгезией ко льду.

1. Laforte J. L., Allaire M. A., Laflamme J. State-of-the-art on power line de-icing // Atmospheric Research. 1998. Т. 46. № 1-2. С. 143-158.
2. Laakso, T., Holttinen, H., Ronsten, G., Tallhaug, L., Horbaty, R., Baring-Gould State of the art of wind energy in cold climates // IEA annex XIX. 2003. Т. 24.
3. Ryerson C. C. Ice protection of offshore platforms // Cold Regions Science and Technology. 2011. Т. 65. № 1. С. 97-110.
4. Yeong Y. H., Milionis A., Loth E., Sokhey J. Self-lubricating icephobic elastomer coating (SLIC) for ultralow ice adhesion with enhanced durability Cold Regions Science and Technology. 2018. Т. 148. С. 29-37. doi.org/10.1016/j.coldregions.2018.01.005.
5. Yang Liu, Liqun Ma, Wei Wang, Arun Kotta, Hui Hu An Experimental Study on Soft PDMS Materials for Aircraft Icing Mitigation // Applied Surface Science. 2018. Т. 447. С. 599-609. doi.org/10.1016/j.coldregions.2018.01.005.
6. Valentini, L., Bon, S. B., Hernández, M., López-Manchado, M. A., Pugno, N. M. Nitrile butadiene rubber composites reinforced with reduced graphene oxide and carbon nanotubes show superior mechanical, electrical and icephobic properties // Composites Science and Technology. 2018. Т. 166. С. 109-114.
7. Golovin K., Kobaku S. P., Lee D. H., Diloreto E. T., Mabry J. M., Tuteja A. De-signing durable icephobic surfaces // Science advances. 2016. Т. 2. №. 3. С. e1501496.

Исследование микроструктуры и электрофизических свойств тонких пленок ЦТС, изготовленных двухстадийным методом

М.В. Старицын¹, В.П. Пронин², М.Л. Федосеев¹, Н.Ф. Дроздова¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург

²РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург

Интерес, проявляемый к изучению тонких сегнетоэлектрических пленок, обусловлен возможностью их применения в устройствах микроэлектромеханики, инфракрасной технике, в СВЧ-электронике [1]. Одним из основных сегнетоэлектрических материалов демонстрирующим подходящие для названных применений свойства является твердый раствор цирконата-титаната свинца (ЦТС). Для успешного внедрения в производство, тонкие пленки должны обладать устойчивостью к внешним воздействиям, в частности, к приложению сильных электрических полей. Подобными свойствами обладают так называемые самополяризованные (униполярные) пленки, в которых полярное состояние образуется в процессе их формирования [2]. Известно, что структура и физические свойства пленок определяются технологией их формирования. В этой связи, в настоящей работе методом ВЧ магнетронного распыления были сформированы самополяризованные тонкие пленки ЦТС при вариации расстояния мишень-подложка и с использованием различных структурных методов исследована их микроструктура, состав и диэлектрические свойства.

Тонкие пленки ЦТС осаждались на платинированные кремниевые подложки при низких температурах. Их толщина составляла 500 нм. Кристаллизация в фазу перовскита проводилась на воздухе в печи при температуре 580 °С. Расстояние мишень-подложка изменялось в диапазоне 30-70 мм. Осаждение пленок проводилось во всех случаях при одной мощности магнетрона. При этом для получения пленок одной толщины изменялось время осаждения – от 1 часа (при $d = 30$ мм) до 3,5 часов (при $d = 70$ мм). Исследовались морфология поверхности пленок, их состав, получена информация о распределении кристаллографических ориентировок фазы перовскита по поверхности. Основное внимание в работе было уделено изучению природы лучистой структуры наблюдаемой в пределах сферолитовых островков перовскита, охарактеризована зависимость ее параметров от технологических режимов изготовления пленок ЦТС. Данные получены с применением метода дифракции отраженных электронов, рентгеноспектрального микроанализа и других методов, реализованных на базе растровой и просвечивающей электронной микроскопии. Кристаллическая структура образцов контролировалась методом рентгеноструктурного анализа. Диэлектрические измерения проводились с использованием измерителя иммитанса Е7-20.

Экспериментальные исследования выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Состав, структура и свойства конструкционных и функциональных материалов» НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей» при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования – соглашение № 13.ЦКП.21.0014 (075-11-2021-068). Уникальный идентификационный номер - RF----2296.61321X0014.

1. Processing, Structure, Properties, and Applications of PZT Thin Films / N. Izyumskaya, Y.-I. Alivov, S.-J. Cho, H. Morkoç, H. Lee, Y.-S. Kang // Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences. 2007, 32:3, 111-202.

2. Внутреннее поле и самополяризация в тонких пленках цирконата-титаната свинца / В.В. Осипов, Д.А. Киселев, Е.Ю. Каптелов, С.В. Сенкевич, И.П.Пронин // ФТТ. 2015. № 57. С. 1748-1754.

Плазмонные структуры на основе серебряных и золотых наночастиц модифицированных хелаторами циклен и тетракетан: получение и оптические свойства

А.С. Стрельников, В.О. Свинко, А.Н. Смирнов, Е.В. Соловьева

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Системы, в которых наночастицы (НЧ) благородных металлов образуют организованные структуры контролируемого размера и архитектуры, перспективны для широкого круга применений. В связи с этим их синтез и поиск путей стабилизации от неуправляемой агрегации и, как следствие, седиментации представляют интерес. Кроме того, для таких систем целесообразно исследование их оптического отклика. Как показано ранее [1], производные стильбена оказались эффективными молекулярными линкерами для НЧ серебра, позволяя добиться воспроизводимого получения плазмонных наноструктур, способных эффективно локализовать электромагнитное поле. В данной работе впервые изучена модификация НЧ серебра и золота посредством двух соединений, относящиеся к полифункциональным лигандам класса азамacroциклов, которые потенциально могут выступать в той же роли молекулярного линкера: циклен и тетракетан. Так, уже было исследовано влияние азамacroциклов на образование коллоидных частиц SiO₂ в процессе Штобера [2]. Благодаря циклическому строению, эти лиганды могут обеспечить иное расположение НЧ в связанных агломератах, что приведет к получению структур с новыми оптическими свойствами.

Модификация НЧ серебра и золота азамacroциклами проведена при различных параметрах синтеза: концентрация соединения, режим дозирования и др. Полученные системы исследованы с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), спектроскопии поглощения в УФ и видимой области, а также спектроскопии Гигантского комбинационного рассеяния (ГКР).

ПЭМ изображения свежеприготовленных растворов модифицированных НЧ доказывают образование их агломератов. Очевидно, что реализуется сшивка НЧ под действием тетракетана, но сопровождается при этом дальнейшей агрегацией, в то время как модифицированные цикленом агломераты оказываются стабильными. В спектрах поглощения, помимо основной полосы плазмонного резонанса НЧ, отмечено появление новой компоненты в длинноволновой области. Визуальные наблюдения показывают обесцвечивание растворов наночастиц серебра и золота в присутствии тетракетана через сутки. Наиболее интенсивные спектры ГКР получены для тетракетана, для которого наблюдается немонотонная концентрационная зависимость. На втором этапе работ предпринята попытка стабилизации агломератов НЧ с тетракетаном бромидом цетилтриметиламмония (ЦТАБ). Несколько схем стабилизации привели к одному и тому же результату: в присутствии ЦТАБ сигнал ГКР от тетракетана не обнаруживается. Это говорит о более сильной адсорбции молекул ЦТАБ, блокирующих доступ лиганда к поверхности. Результаты работы показывают, что азамacroциклы эффективно взаимодействуют с поверхностью НЧ серебра и золота, но образующиеся агломераты демонстрируют низкую стабильность. Дальнейшая работа будет направлена на поиск мягкого метода стабилизации наночастиц, модифицированных азамacroциклами, без потери ГКР-отклика от них.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №20-33-70034). Авторы выражают благодарность ресурсным центрам СПбГУ: «Нанотехнологии», «ОЛМИВ», «ТКМИ», «МАСВ».

1. Solovyeva E. V., Ubyivovk E. V., Denisova A.S. Effect of diaminostilbene as a molecular linker on Ag nanoparticles: SERS study of aggregation and interparticle hot spots in various environments // Coll. Surf. A Elsevier, 2018. Vol. 538. P. 542–548.
2. Masse S., Laurent G., Coradin T. Influence of cyclic polyamines on silica formation during the Stöber process // Phys. Chem. Chem. Phys. The Royal Society of Chemistry, 2009. Vol. 11, № 43. P. 10204–10210.

Изучение рекристаллизации ферромагнитного сплава системы Mn-Al после деформации методом КВД

А.С. Фортуна¹, М.В. Горшенков¹

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

Ферромагнитные сплавы системы Mn-Al (Mn 51-58 % ат.), имеющие структуру метастабильной τ -фазы с решёткой $L1_0$, известны давно [1]. В настоящее время вследствие роста цен на редкоземельные металлы возник спрос на дешёвые магниты с максимальным энергетическим произведением около $(BH)_{max} = 100$ кДж/м³, к таким материалам относятся сплавы τ -MnAl [2]. Предлагались различные стратегии обработки сплавов Mn-Al, позволяющие получить оптимальную с точки зрения магнитных свойств структуру [3]. Влияние методов холодной деформации и последующей рекристаллизации на структуру τ -MnAl изучено недостаточно. Поэтому целью данной работы являлось установление влияния интенсивной пластической деформации, осуществляемой методом кручения под высоким давлением (КВД), и последующей рекристаллизации на структуру и свойства магнитотвёрдого сплава системы Mn-Al.

В работе исследовался сплав состава (в атомных долях): Mn – 52,0 %, Al – 44,6 %, C – 1,7 %, Cu – 1,4 %, Ti – 0,3 %. Структура исходного образца представляла собой чистую τ -фазу. Интенсивную пластическую деформацию осуществляли методом КВД на наковальне Бриджмена, приложенное давление 5 ГПа, скорость деформации 1 об/мин. Отжиг деформированных образцов проводился при температурах 450 и 600 °С, выдержка 1 час.

Деформация методом КВД не приводила как к распаду метастабильной фазы на стабильные составляющие, так и к образованию новых фаз. Для деформированных образцов измерялся параметр порядка по отношению интегральной интенсивности рентгеновских линий I_{100}/I_{110} . Деформация методом КВД вызвала снижение параметра дальнего порядка σ . Зависимость параметра дальнего порядка от величины деформации (количества оборотов N) носит немонотонный характер, представляя собой кривую с минимумом. Минимальное значение достигается при деформации N=3. Деформация больше N=3 ведёт к незначительному росту σ [4].

Немонотонное поведение зависимости можно объяснить тем, что при деформации менее чем на N=3 оборота, пластическая деформация протекает преимущественно по механизму дислокационного скольжения, что подтверждается исследованиями методом ПЭМ. Повышение плотности дислокаций приводит к образованию «разупорядочивающих» дислокаций $1/2\langle 101 \rangle$, вследствие чего снижается параметр порядка. Повышение плотности дислокаций приводит к росту коэрцитивной силы, достигающей при N=3 величины 182 кА/м, причём закрепление доменных стенок происходит на «разупорядочивающих» дислокациях. Деформирование более чем на три оборота приводит к усилению механического двойникования, из-за чего несколько восстанавливается дальний порядок. Появление большого числа нанодвойников при N>5 вызывает заметное повышение коэрцитивной силы ($H_c = 296$ кА/м при N=20).

Отжигу подвергали образцы, деформированные на 3 и 20 оборотов, так как первый представляет собой образец с максимальной плотностью дислокаций, а второй – с максимальным числом двойников. После проведения отжига в структуре образуются мелкие включения равновесной фазы (β -Mn), максимальное содержание которой составило 15 об.% для 600°C N=20. Отжиг при 450 °С не приводит к рекристаллизации, только вызывает релаксацию дефектной структуры с формированием дислокационных стенок, а также с исчезновением «разупорядочивающих» дислокаций и нанодвойников, в результате чего существенно снижается коэрцитивная сила ($H_c = 113$ кА/м при N=3, $H_c = 125$ кА/м при N=20). Отжиг при 600 °С привел к появлению в структуре обоих образцов рекристаллизованных зёрен. Доля рекристаллизованных зёрен оказалась выше в образце N=20 – здесь она составила около 70%. В образце, деформированном на N=3, рекристаллизованные зёрна занимают менее 30%. Следовательно, двойникованная структура является более благоприятной для образования новых зёрен, чем структура с высокой плотностью дислокаций. Коэрцитивная сила обоих образцов после рекристаллизационного отжига составила $H_c = 74$ кДж/м³.

Несмотря на низкий уровень полученных магнитных свойств, удалось получить в материале мелкозернистую структуру с относительно низким содержанием парамагнитной фазы β -Mn. Стратегия, которая может быть использована для дальнейшего улучшения магнитных свойств, заключается в применении дополнительной деформации с помощью КВД к полностью рекристаллизованному образцу для увеличения количества двойников в мелкозернистом материале.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (РНФ), проект № 19-72-10160.

1. Kono H. On the ferromagnetic phase in manganese-aluminum system // Journal of the Physical Society of Japan. – 1958. – V13. – P. 1444 – 1451
2. Coey J.M.D. Permanent magnets: Plugging the gap // Scripta Materialia. – 2012. – V. 67 – P. 524-529.
3. Microstructure and magnetic properties of Mn-Al-C permanent magnets produced by various techniques / V.V. Popov, F. MacCari, I.A. Radulov e.a. // Manufacturing Review. – 2021 – V. 8 – P. 1–11.
4. Fortuna A.S., Gorshenkov M.V., R.V. Sundeev. The effect of high-pressure torsion on the structure and long-range order of ferromagnetic τ -MnAl alloy // Materials Letters. – 2021. – V. 296. – 129888. – P. 1–4.

Анализ влияния изменения структуры и фазового состава при сварке на механические свойства трубного сварного соединения из жаропрочного сплава HP40NbTi

М.А. Фролов^{1,2}, Ю.А. Беликова^{1,2}, М.Д. Фукс², С.Ю. Кондратьев¹

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

² Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей» имени И.В. Горынина Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Санкт-Петербург, Россия

Жаропрочные аустенитные сплавы HP40NbTi на основе системы Fe-25Cr-35Ni-0,4C, модифицированные ниобием и титаном, являются основными материалами для изготовления элементов высокотемпературных установок в нефтехимической, химической и металлургической промышленности [1-2]. Ввиду предельных значений скоростей, давлений, температур перемещаемых горючих продуктов, сплавы работают в чрезвычайно сложных условиях одновременного воздействия температур, с локальным перегревом до 1200 °С, внешних нагрузок и агрессивной коррозионной среды. [3]. Оборудование, изготовленное из этих сплавов, как правило, рассчитано на срок службы 100 000 ч., но из-за повреждений компонентов реальный срок службы узлов оборудования варьируется от 30 000 до 60 000 ч [4].

Основными методами изготовления литых заготовок из сплавов HP40NbTi являются статическое и центробежное литье. При изготовлении промышленного оборудования литые детали свариваются ручной аргонодуговой сваркой с V-образной разделкой и применением сварочной проволоки сплошного сечения.

В сварных соединениях микроструктура сварного шва и основного металла состоит из одинаковых фаз. В процессе эксплуатации в этих участках соединения протекают одинаковые фазовые превращения [5-6]. Однако изменение структуры и фазового состава в металле шва и зоне термического влияния может начинаться уже во время сварки и, как следствие, при эксплуатации протекать с большей скоростью по сравнению с основным металлом. Вследствие этого, а также из-за неоднородности свойств, температурного градиента, высоких скоростей охлаждения и напряжений, возникающих в процессе сварки, сварное соединение является потенциальным местом разрушения. Однако результаты опубликованных исследований не позволяют сделать однозначный вывод, что при длительной эксплуатации разрушение оборудования из литых сплавов HP40NbTi происходит преимущественно в сварных зонах. В связи с этим необходимы дальнейшие экспериментальные исследования особенностей формирования микроструктуры сварных соединений из сплавов HP40NbTi и ее влияние на их эксплуатационные свойства.

Целью исследования является детальный анализ структуры на макро- и микро- уровнях и исследование влияния сварки на кратковременные и длительные механические свойства сварного соединения из жаропрочного сплава HP40NbTi.

Исследование микроструктуры и фазового состава сварного соединения проводили методами световой и электронной микроскопии и рентгеноспектрального микроанализа. Установлено, что структура сварного соединения характеризуется выраженной качественной и количественной неоднородностью, значительно различаясь по дисперсности, морфологии и соотношению структурных составляющих, химическому составу фаз в основном металле, зоне термического влияния и металле шва.

Выявлено образование сегрегаций кремния вблизи эвтектических карбидов ниобия и хрома, а также образование интерметаллидной G-фазы на границе включений карбидов и матричной γ -фазы в зоне термического влияния.

Определение кратковременных и длительных механических свойств сварного соединения показало, что выявленные структурные изменения, протекающие при сварке труб, приводят к снижению работоспособности сплава в зоне термического влияния.

1. Орыщенко А.С. Жаростойкие жаропрочные сплавы [Текст] / А.С. Орыщенко — СПб.: Наука, 2011. — 191 с.
2. Орыщенко А.С., Кондратьев С.Ю., Анастасиади Г.П., Фукс М.Д., Петров С.Н. Особенности структурных изменений в жаропрочном сплаве 0.45C-26Cr-33Ni-2Si-2Nb при температурах эксплуатации. Сообщение 2. Влияние высокотемпературной выдержки // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2012. № 1–1 (147). С. 217-228.
3. Масленков С.Б., Масленкова Е.А. Стали и сплавы для высоких температур: Справочник в двух книгах. Книга 1. М.: Металлургия, 1991. – 384 с.
4. Bonaccorsi L., Guglielmino E., Pino R., Servetto C., Sili A. Damage analysis in Fe-Cr-Ni centrifugally cast alloy tubes for reforming furnaces // Engineering Failure Analysis. 2014. V. 36. P. 65-74.
5. Рудской А.И., Орыщенко А.С., Кондратьев С.Ю., Анастасиади Г.П., Фукс М.Д. Механизм и кинетика фазовых превращений в жаропрочном сплаве 45X26H33C2B2 при длительных высокотемпературных выдержках. Часть 1// Металловедение и термическая обработка металлов. 2014. № 1 (703). С. 3-8.
6. Рудской А.И., Кондратьев С.Ю., Анастасиади Г.П., Орыщенко А.С., Фукс М.Д. Механизм и кинетика фазовых превращений в жаропрочном сплаве 45X26H33C2B2 при длительных высокотемпературных выдержках. Часть 2 // Металловедение и термическая обработка металлов. 2014. № 3 (705). С. 12-19.

Моделирование электронной структуры соединений нихония

А.А. Шалаевский¹, Ю.А. Демидов^{1,2}

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

²НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина

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

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

Расчеты проведены с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”.

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

Структурные особенности рекомбинантных белков спидроинов

Р.В. Шариков¹, Т.Х Тенчурин¹, С.И. Белоусов¹, Е.В. Ястремский¹, С.Н Чвалун^{1,2}

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

²*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва*

Секрет паутинных желез многие десятилетия привлекает внимание ученых из-за своих уникальных реологических и биохимических свойств [1, 2]. Каркасная нить, образующаяся после застывания секрета, состоит из двух различных по структуре белков спидроинов MaSp1 и MaSp2. Меняя их количественное соотношение в растворе, паук может варьировать прочность и эластичность нити. Механические свойства паутины делают её идеальным биоматериалом для получения тканей нового поколения и композиционных материалов для авиапромышленности [3]. Однако получение в больших количествах нативной паутины затруднительно. Рекомбинантные аналоги нативных спидроинов легче в производстве, однако, существует ряд проблем, таких как более низкая молекулярная масса и отсутствие терминальных концевых последовательностей, что в свою очередь приводит к низкой их растворимости в водных средах, а также к изменению способности к агрегации белка в растворе.

В работе исследовались реологические свойства водных низкоконцентрированных растворов рекомбинантных спидроинов rS1/9 и rS2/12 – аналогов нативных белков. Показано, что растворы белков с концентрацией 1 мг/мл являются гелеподобными телами и структурированными жидкостями с пределом текучести. Исследование гидродинамического радиуса частиц в таких растворах выявило наличие двух максимумов, что говорит о наличии в растворах как отдельных частиц, так агрегатов. Изучены структуры рекомбинантных белков в растворе и на подложке. Показано, что данные белки способны к самоорганизации в фибриллярные структуры в водных растворах под действием напряжения сдвига.

Изучение свойств молекулярных структур спидроина в растворе позволит подобрать оптимальные параметры их формования для получения волокнистых материалов на их основе с регулируемыми физико-механическими свойствами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90265 «Аспиранты» и Темплана № 1.6 НИЦ «Курчатовский институт».

1. Tenchurin T. K., Sharikov R. V., Chvalun S. N. Advanced Recombinant and Regenerated Silk Materials for Medicine and Tissue Engineering //Nanotechnologies in Russia. – 2019. – Т. 14. – №. 7. – С. 290-310.
2. Debabov V. G., Bogush V. G. Recombinant spidroins as the basis for new materials //ACS Biomaterials Science & Engineering. – 2020. – Т. 6. – №. 7. – С. 3745-3761.
3. Atkison J. H. et al. Crystal structure of the nephila clavipes major ampullate spidroin 1A N-terminal domain reveals plasticity at the dimer interface //Journal of Biological Chemistry. – 2016. – Т. 291. – №. 36. – С. 19006-19017.

Высокопористые материалы на основе хитозана с функциональными добавками для целей регенеративной медицины

Н.А. Шарикова¹, К. Г. Антипова¹, К.И. Луканина¹, Т.Е. Григорьев¹

¹НИИ «Курчатовский институт», Москва

Хитозан – это полисахарид, получаемый посредством частичного деацетилирования хитина. Благодаря антибактериальным свойствам, биосовместимости и биоразлагаемости, хитозан широко используют в различных областях клинической медицины и тканевой инженерии. Однако особенности структуры, кристаллические свойства и чрезвычайно сильные внутри- и межмакромолекулярные водородные связи хитозана приводят к плохим внутренним механическим характеристикам, барьерным свойствам и низкой термической стабильности [1]. В то же время хитозан оптимально подходит в качестве полимерной матрицы для наполнения функциональными агентами, а его высокая биосовместимость позволяет использовать этот полимер, как для остеосинтеза, так и для выращивания нейротканей [2,3].

В данной работе рассматривается проблема создания полимерных композитов различной морфологии на основе хитозана, наполненного восстановленным оксидом графена (вОГ) и трикальцийфосфатом (ТКФ). В качестве субстрата для роста клеточного костного матрикса и нейронов была выбрана форма губки. Как известно, электропроводящие материалы оптимальны для стимуляции роста нервных клеток; поэтому в качестве активного наполнителя выбран восстановленный оксид графена с концентрацией до 8 масс.%. Для формирования костного матрикса использовался наполнитель до 25 об.% трикальцийфосфата.

Полученные хитозановые композиты исследованы методами растровой электронной микроскопии, импедансной спектроскопии; анализ физико-механических характеристик проводился на универсальной машине для испытаний на растяжение. Ультразвуковая микроскопия показала высокую эффективность для неинвазивной визуализации микроструктуры и количественного определения трикальцийфосфата и пониженной концентрации восстановленного оксида графена в хитозановых губках. В работе показана оптимальная степень наполнения полимерной матрицы для достижения приемлемой электропроводности, исследована необходимая нагрузка трикальцийфосфата для обеспечения биоадекватной механики, совместимой с естественными костными тканями, исследованы композиты хитозан/ТКФ/вОГ с различным содержанием проводящего компонента.

Работа выполнена при поддержке ВНИР Курчатовского института приказ №1058 от 2 июля 2020.

1. Silva A. O. et al. Chitosan as a matrix of nanocomposites: A review on nanostructures, processes, properties, and applications //Carbohydrate Polymers. – 2021. – С. 118472.
2. Munhoz M. A. S. et al. Use of collagen/chitosan sponges mineralized with hydroxyapatite for the repair of cranial defects in rats //Injury. – 2018. – Т. 49. – №. 12. – С. 2154-2160.
3. Sadeghi A., Moztarzadeh F., Mohandesi J. A. Investigating the effect of chitosan on hydrophilicity and bioactivity of conductive electrospun composite scaffold for neural tissue engineering //International journal of biological macromolecules. – 2019. – Т. 121. – С. 625-632.

Изучение влияния фрикционного воздействия на эволюцию структуры низкоуглеродистой стали с использованием дифракции синхротронного излучения

К.И. Эмурлаев, И.А. Батаев

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Трение и изнашивание является одним из ключевых процессов, оказывающих существенное влияние на надежность и долговечность разного рода изделий. Превышение критического показателя износа влечет выход из строя оборудования. Экономические потери, обусловленные изнашиванием трущихся деталей, огромны. Несмотря на то, что процессы трения исследуются на протяжении многих десятилетий, единой, общепринятой теории разрушения поверхностного слоя в результате трения до сих пор не существует. По этой причине, процесс трения вызывает большой интерес в научной среде.

Благодаря применению источников синхротронного излучения, обладающих высокой интенсивностью, появилась возможность изучать явления, происходящие непосредственно в области фрикционного взаимодействия. В работах [1, 2] была представлена установка с монокристаллическим сапфировым диском, воздействующим на цилиндрический образец. Использование для нагружения сапфирового диска, прозрачного в видимой и в ближней инфракрасной области и ориентированного таким образом, чтобы минимизировать рентгеновское рассеяние, позволило одновременно фиксировать процессы появления частиц износа, пластической деформации, нагрева и фазовых превращений, происходящих в условиях интенсивного изнашивания стальных материалов.

На основании проведенных исследований можно сделать следующие выводы. Процесс изнашивания при трении углеродистой стали о твердосплавный индентор происходит в условиях совместного действия пластической деформации и окислительных реакций. Процесс пластической деформации в подповерхностных слоях начинает развиваться уже в ходе первого цикла фрикционного взаимодействия. Этот процесс заключается в повышении плотности дислокаций, снижении размеров ОКР и постепенном изменении типа дислокаций, имеющих в поверхностном слое. Количество дефектов быстро достигает порогового значения и в дальнейшем колеблется вблизи него в связи с периодически повторяющимися процессами накопления дефектов и релаксации напряжений за счёт изнашивания материала. При использованных режимах трения на поверхности быстро образуется слой механического перемешивания, состоящий из материала образца и смеси двух типов оксида железа – гематита и магнетита. Отслоение этого слоя, вероятно, представляет собой основной механизм изнашивания [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке НГТУ в рамках научного проекта С-21-15, с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Структура, механические и физические свойства материалов» (№ 13.ЦКП.21.003) Новосибирского государственного технического университета. Дифракционные исследования проводились в Европейском центре синхротронного излучения (г. Гренобль, Франция).

1. In Situ Observation of Crystal Grain Orientation During Scuffing Process of Steel Surface Using Synchrotron X-ray Diffraction / K. Yagi, T. Izumi, J. Koyamachi, S. Sanda, S. Yamaguchi, K. Satio, M. Tohyama, J. Sugimura // Tribology Letters. 2010. – Vol. 68, iss. 4. – P. 1-15. DOI: 10.1007/s11249-020-01357-y.
2. In Situ X-Ray Diffraction Study of Phase Transformation of Steel in Scuffing Process / S. Kajita, K. Yagi, T. Izumi, J. Koyamachi, M. Tohyama, K. Saito, J. Sugimura // Tribology Letters. – 2015. – Vol. 57, iss. 6. – P. 1-11. – DOI: 10.1007/s11249-014-0443-8.
3. A novel operando approach to analyze the structural evolution of metallic materials during friction with application of synchrotron radiation / I. A. Bataev, D. V. Lazurenko, A. A. Bataev, V. G. Burov, K. I. Emurlaev, A. I. Smirnov, A. A. Ruktuev, K. Georgarakis [et al.] // Acta Materialia. – 2020. – Vol. 196. – P. 355–369. – DOI: 10.1016/j.actamat.2020.06.049.

Применение синхротронной микродифрактометрии для анализа структурно-фазовых преобразований в материалах в условиях трения

К.И. Эмурлаев, И.А. Батаев

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Взаимодействие элементов трибологической системы сопровождается сложными явлениями, которые зависят от множества факторов, в частности от свойств материалов, их химического состава, температуры окружающей среды и т.д. [1]. Важную роль в процессах трения и изнашивания имеет структура материалов и особенности её изменения (эволюции) при фрикционном воздействии. Вплоть до настоящего времени эволюция структуры в условиях трения, по большей части, изучается с применением разрушающих методов контроля, например, методами микроскопии.

Для изучения процессов, развивающихся при взаимодействии пар трения, применяется множество различных подходов, в том числе, использующих принципы *in situ* и *operando* контроля. В последнее десятилетие активно развивается дифракционный анализ эволюции структуры в процессе трения с применением синхротронного излучения. Интерес к этому методу обусловлен высокой яркостью синхротронного излучения по сравнению с лабораторными дифрактометрами. Применение дифракции синхротронного излучения позволяет получать информацию о структуре и фазовом составе материалов с высоким временным и пространственным разрешением и в ряде случаев установить *in situ* или *operando* наблюдение непосредственно в ходе фрикционного взаимодействия элементов пары трения [2, 3]. Анализируя форму профилей дифракционных максимумов, можно получить данные о размерах областей когерентного рассеяния (ОКР), уровне микроискажений кристаллической решётки, дислокационной структуре и других характеристиках микроструктуры.

В данной работе метод дифракции синхротронного излучения и последующий профильный анализ полученных дифракционных картин использовался для анализа эволюции микроструктуры стали 110Г13Л в условиях фрикционного воздействия. Трение высокомарганцевой стали сопровождается накоплением дефектов кристаллической решетки, что выражается в изменении полуширины профилей дифракционных максимумов. Зафиксированные экспериментально дефекты структуры обусловлены увеличением микроискажений решетки аустенита и уменьшением размеров областей когерентного рассеяния. Показано, что фрикционное взаимодействие приводит к анизотропному сдвигу дифракционных максимумов аустенита, что указывает на повышение вероятности образования дефектов упаковки и снижение энергии дефектов упаковки. Явных признаков механически-индуцированных фазовых превращений не выявлено.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90119, с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Структура, механические и физические свойства материалов» (№ 13.ЦКП.21.003) Новосибирского государственного технического университета. Дифракционные исследования проводились в Европейском центре синхротронного излучения (г. Гренобль, Франция).

1. Wear processes in sliding systems / D. Rigney, L.H. Chen, M.G.S. Naylor, A.R. Rosenfield // Wear. – 1984. – Vol. 100. P. 195-219. – DOI: 10.1016/0043-1648(84)90013-9.
2. In Situ X-Ray Diffraction Study of Phase Transformation of Steel in Scuffing Process / S. Kajita, K. Yagi, T. Izumi, J. Koyamachi, M. Tohyama, K. Saito, J. Sugimura // Tribology Letters. – 2015. – Vol. 57, iss. 6. – P. 1-11. – DOI: 10.1007/s11249-014-0443-8.
3. A novel operando approach to analyze the structural evolution of metallic materials during friction with application of synchrotron radiation / I. A. Bataev, D. V. Lazurenko, A. A. Bataev, V. G. Burov, K. I. Emurlaev, A. I. Smirnov, A. A. Ruktuev, K. Georgarakis [et al.] // Acta Materialia. – 2020. – Vol. 196. – P. 355–369. – DOI: 10.1016/j.actamat.2020.06.049.

Селективные сенсоры водорода на основе структур Pt- α -Ga₂O₃:Sn-Pt

Н. Н. Яковлев¹, А. В. Алмаев¹

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия*

В настоящий момент растет интерес к корундообразной α фазе Ga₂O₃, вызванный перспективностью использования данного полиморфа оксида галлия в качестве материала для силовой электроники и солнечнослепых фотодетекторов [1-2].

В работах [3-5] было исследовано влияние газов на электрические и газочувствительные свойства гетерофазных структур α -Ga₂O₃- ϵ -Ga₂O₃:Sn. Чувствительность таких структур к газам зависит от концентрации донорной примеси Sn и содержания α и ϵ фаз. Варьируя эти параметры можно добиться чувствительности к различным газам, начиная с комнатной температуры, что является важным при разработке сенсоров с малым потреблением энергии и систем на их основе. Газовая чувствительность α -Ga₂O₃ без включений других фаз остается не исследованной. Существующие трудности в объяснении сенсорного эффекта для гетерофазных структур Ga₂O₃ требуют подробного исследования газочувствительных свойств α -Ga₂O₃ без включений других фаз. Данная работа посвящена исследованию газочувствительных свойств α -Ga₂O₃:Sn с различной степенью легирования.

Образцы α -Ga₂O₃:Sn были синтезированы методом HVPE на подложках сапфира с ориентацией (0001) и толщиной 430 мкм ООО «Совершенные Кристаллы». Хлорид галлия и кислород использовались в качестве прекурсоров. Легирование оловом проводилось в процессе синтеза слоев α -Ga₂O₃.

В ходе выполнения работы были исследованы образцы α -Ga₂O₃ с N_d от 10^{16} до 10^{18} см⁻³. В качестве металла контактов использовались Pt и Ti/Au. Контакт Ti/Au получился омическим и образцы с такими контактами не проявляли чувствительности на воздействие газов (H₂, CO, O₂, NO и NH₃), независимо от N_d.

В диапазоне напряжений U = 0 – 50 В вольтамперные характеристики (ВАХ) образцов с Pt контактами спрямляются в координатах ln(I) от U^{0,25}, что согласуется с моделью, предложенной для описания тока в MSM (metal-semiconductor-metal) структурах на основе теории термоэлектронной эмиссии в диодном приближении [6], где I ток протекающий через образец. Образцы с низким N_d, 10^{16} см⁻³, не проявляют чувствительность на воздействие водородом во всем интервале исследуемых температур 150 – 500 °С. С ростом N_d на один порядок появляется чувствительность на водород при нагреве до 400 °С. Образцы с N_d 10^{18} см⁻³ проявляют чувствительность на водород в диапазоне температур 150 – 500 °С и больше чувствительности образцов с низким N_d на 2-3 порядка.

Отклик S_T был рассчитан по формуле:

$$S_T = |I_0 - I_g|/I_0, \quad (1)$$

I₀ – квазистационарное значение тока, протекающего через образец в атмосфере чистого воздуха, I_g – квазистационарное значение тока, протекающего через образец при воздействии газа.

При T = 350 °С образцы с N_d 10^{18} см⁻³ демонстрируют S_T ≈ 80 отн. ед. при концентрации H₂ n_{H2} = 10000 ppm. Структуры α -Ga₂O₃:Sn обладают широким динамическим диапазоном чувствительности, даже при воздействии 10000 ppm водорода не стремятся к насыщению. Образцы при воздействии водорода проявляют незначительный дрейф тока, а отклик на 10000 ppm H₂ в течение пяти воздействий уменьшился на 6 %. Времена отклика и восстановления, которые определяют быстродействие сенсоров [4-5], составили 88 и 71 с, соответственно. Кроме этого, структуры α -Ga₂O₃:Sn с Pt контактами не проявляют чувствительности на воздействие CO, O₂, NO и NH₃, но выдержка в атмосфере с NO приводит к уменьшению времен отклика и восстановления у образцов при воздействии H₂ вплоть до ≤ 10 с.

Механизм изменения тока структур при воздействии H₂ обусловлен изменением условий протекания тока на границе раздела металл-полупроводник. Молекула H₂ диссоциирует после адсорбции на поверхности каталитически активной Pt. Затем атомы H диффундируют через слой металла к границе раздела металл-полупроводник. На этой границе раздела образуется дипольный слой атомов H, что приводит к уменьшению высоты потенциального барьера для электронов на границе раздела металл-полупроводник и увеличению тока. Время диффузии атома H через слой Pt, толщиной 330 нм, составляет около 10⁻⁶ с. Для других газов CO, O₂, NO и NH₃ коэффициенты диффузии в Pt значительно ниже, чем для H, поэтому их времена диффузии через рассматриваемый слой Pt составляет около 10⁸-10¹⁰ с. Таким образом, селективность структуры α -Ga₂O₃:Sn к H₂ в случае относительно толстых слоев контакта Pt обусловлена диффузионными ограничениями. Контакт Pt является сплошным.

Роль N_d в чувствительности структур α -Ga₂O₃:Sn к H₂ заключается в изменении соотношения между сопротивлением квазинейтрального слоя полупроводника R_S и сопротивлением области пространственного заряда (ОПЗ) обратно смещенного диода R_R. При низком N_d изменение высоты потенциального барьера при воздействии H₂ невозможно зарегистрировать из-за высокого значения R_S. Увеличение N_d приводит к уменьшению R_S, и вклад изменения высоты потенциального барьера на границе раздела металл-полупроводник при воздействии H₂ становится значительным.

Таким образом, структуры Pt- α -Ga₂O₃:Sn-Pt с N_d 10^{18} см⁻³ в диапазоне температур от 150 до 500 °С характеризуются высокой чувствительностью к H₂. Отклик на 10000 ppm H₂ при 350 °С составляет 80 отн. ед. Структуры не проявляют чувствительности к CO, O₂, NO и NH₃. α -Ga₂O₃:Sn демонстрируют низкое быстродействие при воздействии H₂, однако предварительная обработка образцов в газовой смеси чистый воздух + NO уменьшает времена отклика и восстановления до ≤ 10 с. Сенсорный эффект объясняется уменьшением потенциального барьера на границе Pt / α -Ga₂O₃:Sn при воздействии H₂.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20 79-10043).

1. Perspective: Ga₂O₃ for ultra-high power rectifiers and MOSFETS / S. J. Pearton, F. Ren, M. Tadjer, J. Kim // Journal of Applied Physics. 2018. Vol. 124. 220901.
2. Xiaohu Hou et al. Review of polymorphous Ga₂O₃ materials and their solar-blind photodetector applications // 2021/ J. Phys. D: Appl. Phys. Vol. 54. № 4 043001
3. Hydrogen influence on electrical properties of Pt-contacted α -Ga₂O₃/epsilon-Ga₂O₃ structures grown on patterned sapphire substrates / A.V. Almaev, V.I. Nikolaev, S.I. Stepanov, A.I. Pechnikov, A.V. Chikiryaka, N.N. Yakovlev, V.M. Kalygina, V.V. Kopyev, E.V. Chernikov // J. Phys. D: Appl. Phys. 2020. Vol. 53. № 41 414004 (9pp)
4. Effect of oxygen on the electrical conductivity of Pt contacted α -Ga₂O₃/ ϵ -Ga₂O₃ MSM structures on patterned sapphire substrates / N. N. Yakovlev, V. I. Nikolaev, S. I. Stepanov, A. V. Almaev, A. I. Pechnikov, E. V. Chernikov, B. O. Kushnarev // IEEE Sensors Journal. 2021. Vol 53. № 3 P. 14636-14644.
5. Effect of ambient humidity on the electrical conductivity of polymorphic Ga₂O₃ structures / A.V. Almaev, V.I. Nikolaev, S.I. Stepanov, N.N. Yakovlev, A.I. Pechnikov, E. V. Chernikov, B. O. Kushnarev // Semiconductors. 2021. Vol. 55. №. 3. P. 346-353.
6. Elhadidy H., Sikula J., Franc J. Symmetrical current–voltage characteristic of a metal–semiconductor–metal structure of Schottky contacts and parameter retrieval of a CdTe structure // Semicond. Sci. Technol. 2012. № 27. 015006 (6pp).

**Исследование свойств каталитических покрытий,
полученных методом холодного газодинамического напыления**

Н.В. Яковлева, А.М. Макаров

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

Одним из перспективных способов напыления пористого каталитического носителя в конвекторе получения водородного топлива в виде синтез-газа для питания батарей топливных элементов является холодное газодинамическое напыление (ХГДН) [1]. В основе процесса ХГДН лежит формирование сверхзвукового (500-1000) м/с газового потока, введение в поток частиц порошка размером 10-80 мкм и направление частиц на поверхность покрываемой детали. Температура потока 80-100 °С гарантирует отсутствие окисления и сохранение фазового состава материала порошка [2].

Метод ХГДН позволяет получить покрытия широкого диапазона составов, включая композиционные покрытия в виде смеси металлов и керамики [3].

В данной работе приводятся результаты исследования композиционного каталитического покрытия системы Ni-Al-Al(OH)₃ на металлическую подложку, изготовленную из ферритной стали марки X15Ю5. Для получения покрытий были приготовлены порошковые композиции составов на основе системы Ni-Al-Al(OH)₃ с разным содержанием Ni, Al, Al(OH)₃.

Опробована двухступенчатая технология изготовления каталитического носителя на основе Al₂O₃ на металлической подложке. Технология состоит из напыления методом ХГДН с последующим отжигом при 600 °С. Во время отжига гидроксид Al(OH)₃ превращается в γ-Al₂O₃ с выделением паров воды, что приводит к разрыхлению покрытия со значительным повышением пористости покрытия.

Изучение фазовых превращений в композиционном носителе во время нагрева при температурах до 800 °С подтвердило образование интерметаллидов системы Ni-Al и выделение Al₂O₃ при дегидратации Al(OH)₃. Испытание покрытий ХГДН состава Ni-Al-Al(OH)₃ на стальной подложке в условиях интенсивной вибрации под действием ультразвука подтвердили высокую адгезионную прочность большинства составов покрытий.

Результаты термоциклических испытаний образцов покрытий с охлаждением на воздухе, воде и жидком азоте показали, что покрытия ХГДН обладают более высокой термоциклической прочностью по сравнению с покрытиями, полученными методом микроплазменного напыления.

1. F. Wang, D. Zhang, S. Zheng, B. Qi. Characteristic of cold sprayed catalytic coating for hydrogen production through fuel reforming // International journal of hydrogen energy. – 2010. –V.35, P. 8206-8215.
2. Малышевский, В.А. Создание объемно-пористых наноструктурированных функционально-градиентных покрытий для эффективных каталитических систем конверсии углеводородного топлива. / В.А Малышевский, Б.В. Фармаковский. // Сб. докладов 2-го Международного научно-технического симпозиума «Наноструктурные функциональные покрытия и материалы для промышленности» Харьковская нанотехнологическая Ассамблея-2007. Т.1. 23-27 апреля 2007. С.88.
3. Шишкова М.Л., Яковлева Н.В. Каталитически активные покрытия для систем паровой конверсии природного газа: синтез и каталитические свойства // Вопросы материаловедения. - 2018 - 2(94), С.96-105.

Проведение гомогенизирующего отжига стали мартенситного класса, полученной методом селективного лазерного сплавления, и его влияние на структуру и свойства

В.В. Махорин, М.И. Оленин, А.Д. Кашианов, О.Н. Романов

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

Одним из основных материалов элементов оборудования и сосудов давления тепловой и атомной энергетики [1], а также деталей конструкций газотурбинных двигателей [2], являются высокохромистые стали мартенситного класса. Известна проблема образования повышенной доли δ -феррита в фазовом составе сталей данного класса, приводящая к снижению механических и вязкопластических свойств. Также известны методы борьбы с выделением δ -феррита, в частности установлено снижение содержания δ -феррита в стали мартенситного класса марки 07X16H4B за счет гомогенизирующего отжига [3, 4]. При этом полученные результаты имеют отношение только к сталям, изготовленным при помощи традиционных методов, такими как литьё и ковка, тогда как влияние гомогенизирующего отжига на материалы, произведенные методом селективного лазерного сплавления, не до конца выявлено.

Целью настоящей работы было исследование влияния гомогенизирующего отжига на структуру и свойства стали 07X15H5Д4Б, полученной методом селективного лазерного сплавления (СЛС).

Исследование проводилось на заготовках диаметром $\varnothing 7$ мм из высокохромистой стали мартенситного класса марки 07X15H5Д4Б, изготовленных методом СЛС. После термической обработки в электрической печи, были проведены испытания по ГОСТ 1497-84 с целью определения механических свойств стали при комнатной температуре.

Кроме того, проводились количественные металлографические исследования основных структурных составляющих при помощи светового металлографического микроскопа UNIMET SERIESMR, оснащенного цифровой камерой EPSON 3100Z.

Выбор режима гомогенизирующего отжига был основан на анализе ранее полученных результатов на стали марки 07X16H4B [3, 4], имеющей схожий химический состав с исследуемой в настоящей работе сталью марки 07X15H5Д4Б. Установлено, что наиболее эффективный режим для стали марки 07X16H4B является гомогенизирующий отжиг при температуре 1150 °С. Было предположено, что аналогичный режим гомогенизирующего отжига может быть использован и для стали марки 07X15H5Д4Б, полученной методом СЛС.

По результатам исследований в структуре стали марки 07X15H5Д4Б, термообработанной по режиму без гомогенизирующего отжига [5], была выявлена трековая (ячеистая) структура со значительными выделениями δ -феррита, в количестве до 5 %.

В тоже время, микроструктура заготовок стали, подвергнутых гомогенизирующему отжигу в течение 8 часов при температуре 1150 °С, с последующими закалкой и старением, проведенных по режиму [5], отличалась изотропной структурой в различных направлениях металлографического исследования без следов треков, а также δ -феррита.

В результате проведения данной термической обработки была достигнута стабилизация структуры и механических свойств, подтвержденная механическими испытаниями. Установлено, что данный режим термической обработки позволил увеличить предел текучести $\sigma_{0,2}$ на 19% при незначительном снижении пластических свойств.

Внедрение гомогенизирующего отжига в режим термической обработки позволило добиться повышения прочностных свойств и стабилизации структуры на заготовках из стали марки 07X15H5Д4Б, полученных методом селективного лазерного сплавления.

Экспериментальные исследования выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Состав, структура и свойства конструкционных и функциональных материалов» НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей».

1. Азбукин В.Г., Горынин В.И., Павлов В.Н. Перспективные коррозионно-стойкие материалы для оборудования и трубопроводов АЭС. – СПб.: ЦНИИ КМ «Прометей», 1997. – 118с.
2. Материалы и прочность деталей газовых турбин. В двух книгах. Кн. 1 – Рыбинск: ООО «Издательский дом «Газотурбинные технологии», 2010 – 611 с.
3. Патент РФ № 2388833. Способ термической обработки высокопрочной коррозионно-стойкой стали мартенситного класса / Оленин М. И., Бережко Б. И., Горынин В. И., Павлов В. Н., Быковский Н. Г., Осипова И. С. Опубликовано 10.05.2010. Бюл. № 13.
4. Оленин М.И., Павлов В.Н., Быковский Н.Г., Башаева Е.Н., Гусельникова Т.М. Влияние гомогенизации на хладостойкость высокопрочных коррозионно-стойких сталей // Вопросы материаловедения. – 2009. – № 2(58). – С. 33–37.
5. Липпольд Д., Котеки Д. Металлургия сварки и свариваемость нержавеющей сталей / Пер. с англ. / Под ред. Н. А. Соснина, А.М. Левченко. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. – 467 с.

Влияние облучения Ga⁺ и He⁺ на катодолюминесценцию гексагонального нитрида бора

О.А. Гозина¹, Ю.В. Петров¹, О.Ф. Вывенко¹

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет, г. Санкт-Петербург

С каждым годом интерес к гексагональному нитриду бора (h-BN) у научного сообщества только растёт. Изучение люминесцентных свойств этого материала, является наиболее перспективным направлением. В 1950 году уже были проведены первые исследования люминесценции, в частности катодолюминесценции (КЛ) [1]. В 2004 году экспериментально был получен пик КЛ в области 215 нм, и только в 2018 году были обнаружены ещё несколько полос люминесценции в видимом и ближнем ультрафиолетовом диапазоне, которые обусловлены различными точечными дефектами [2]. Учёные активно обсуждают применение гексагонального нитрида бора в качестве источника одиночных фотонов для оптоэлектроники, в том числе в технологиях квантовой информатики и h-BN является многообещающим материалом [3, 4]. В связи с этим представляет большой интерес поиск методов управления люминесцентными свойствами путём контролируемого локального создания или, наоборот, устранения имеющихся точечных дефектов.

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию ионно–индуцированных дефектов тонкого монокристалла h-BN, перенесенного на подложку Si₃N₄/Si после отслаивания от объемного кристалла. В работе проводилось облучение сфокусированными ионными пучками (ФИП) Ga⁺ и He⁺. Нами было рассмотрено влияние этих пучков на люминесцентные свойства h-BN.

Чтобы реализовать облучение сфокусированным ионным пучком Ga⁺ эксперимент проводился с использованием двухлучевой системы Zeiss Auriga. Облучение проводилось дозами в диапазоне $5.6 \cdot 10^{12} - 1.1 \cdot 10^{15}$ 1/см². Толщина облучаемого образца составляла ~170 нм. Облучение ионами He⁺ проводилось с использованием гелиевого ионного микроскопа Zeiss Orion с током пучка I=0.3 пА и энергией с дозами в диапазоне $5 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{16}$ 1/см². Для обоих пучков энергия облучения составляла E =30 кэВ.

Регистрация спектров проводилась в диапазоне длин волн 200 – 700 нм, а энергия возбуждения электронами составляла 5 кэВ. Сканирование проводилось непрерывно, и время регистрации точки одной точки спектра варьировалась от 0,5 до 2 секунд. Спектральное разрешение выбрано в диапазоне 1–2 нм.

В результате экспериментов установлено, что облучение ионным пучком Ga⁺ приводит к угасанию полос люминесценции. Мы считаем, что такое явление связано либо уменьшением числа дефектов, являющихся центрами люминесценции, либо появлением новых дефектов, приводящих к безызлучательной рекомбинации электронно–дырочных пар. У полосы 4эВ зафиксировано наибольшее падение интенсивности, что, скорее всего, связано с диффузией углерода с поверхности образца, поскольку возможно дефектообразование в приповерхностной области при облучении галлием.

Облучение ионами гелия также приводит к уменьшению интенсивности полос КЛ. Однако при определенных дозах интенсивность приходит к насыщению, что может быть связано с образованием квазистационарной концентрации центров безызлучательной рекомбинации и требует проведения дальнейших исследований.

Исследование проводилось на базе ресурсного центра по направлению «Нанотехнологии» СПбГУ.

- [1] Larach S., Shrader R. E. Multiband luminescence in boron nitride //Physical Review. – 1956. – Т. 104. – №. 1. – С. 68.
- [2] Weston L. et al. Native point defects and impurities in hexagonal boron nitride //Physical Review B. – 2018. – Т. 97. – №. 21. – С. 214104.
- [3] Bourrellier R. et al. Bright UV single photon emission at point defects in h-BN //Nano letters. – 2016. – Т. 16. – №. 7. – С. 4317–4321.
- [4] Castelletto S. et al. Hexagonal boron nitride: a review of the emerging material platform for single–photon sources and the spin–photon interface //Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2020. – Т. 11. – №. 1. – С. 740–769.

Модификация морфологии пористых материалов на основе ПВС путем варьирования условий заморозки

К.Ю. Базылева^{1,2}, К.Г. Антипова², С.Н. Малахов², Т.Д. Пацаев², Р.В. Шариков²,
Т.Е. Григорьев²

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

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Поливиниловый спирт (ПВС) – водорастворимый и биосовместимый полимер. Материалы из ПВС используют в биомедицине и фармацевтике для множества применений, таких как, изготовление носителей для адресной доставки лекарств и тканеинженерных трансплантатов различных органов [1]. Для обозначенных применений требуется тонкая настройка характеристик биоматериала, которой можно добиться варьированием способа и условий процесса его получения. Одним из распространенных методов получения высокопористых материалов является сублимационная сушка (лиофилизация).

Первая стадия сублимационной сушки - процесс заморозки. На этом этапе происходит формирование структуры будущих материалов [2-3]. В зависимости от скорости и способа заморозки можно изменять пористость, размер пор и удельную площадь поверхности образцов. Такие морфологические особенности определяют область применения полученных материалов. Данная работа посвящена исследованию влияния условий заморозки на морфологию высокопористых губчатых материалов на основе ПВС, полученных методом сублимационной сушки.

Для синтеза материалов использовали водный раствор ПВС (Sigma-Aldrich, США, $M_w = 130$ кДа) с концентрацией 6%, в который добавляли сшивающий агент – глутаровый альдегид (Sigma-Aldrich, США, 50% водный раствор) в соотношении 0,005 и 0,01 к 1 осново-моль полимера в присутствии соляной кислоты (Компонент-Реактив, Россия, о.с.ч.). После смешивания полученную смесь разделяли для изготовления изотропных и анизотропных губок. Анизотропные материалы замораживали в условиях температурного градиента, который обеспечивает рост кристаллов растворителя в выделенном направлении. Изотропные губки получали с различной скоростью заморозки - раствор помещали в морозильные камеры при температурах -25 °С и -70 °С, а оставшуюся часть замораживали в жидком азоте. После все замороженные материалы лиофилизировали на установке Martin Christ Alpha 2-4LSC installation в течении 72 ч при глубине вакуума 0,250 мбар.

В работе исследовали изменение светопропускания в процессе заморозки с использованием спектрометра Ocean Optics. Зависимость температуры от времени фиксировали с помощью сенсора Termodat-1,3М.

Исследование морфологии образцов проводили при помощи растрового электронного микроскопа Phenom XL (ThermoFisher Scientific, США). Изображения получали с использованием детектора обратно рассеянного электронов при ускоряющем напряжении 5 кВ и давлении 10 Па без предварительного нанесения токопроводящего покрытия на образец. Структуру образцов в набухшем состоянии исследовали с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) в режиме окружающей среды (ЕСЭМ) на приборе Versa 3D DualBeam (Thermo Fisher Scientific, USA). Для исследования ЕСЭМ гидратированные образцы губок помещали на предварительно охлажденный до 10 °С столик Пельтье в камере СЭМ, которую затем откачивали до давления 1224 Па. Влажность в камере последовательно снижалась со 100% до 30%. Изображения в режиме ЕСЭМ были получены с использованием низковакуумного детектора вторичных электронов GSED при ускоряющем напряжении 10 кВ и токе 93 пА.

В результате работы получен ряд губчатых материалов на основе ПВС с различной архитектурой. Сопоставление температурных кривых и кривых светопропускания показало, что в момент начала кристаллизации пропускающая способность раствора снижается до нуля. Это позволяет использовать турбодиметрию, как метод контроля процесса заморозки и детектирования времени начала кристаллизации. Проведен анализ морфологии образцов с различной концентрацией сшивающего агента и условиями заморозки. Установлено, что скачок на температурной кривой, соответствующий степени переохлаждения, уменьшается и, впоследствии, исчезает с увеличением скорости заморозки. При этом снижается размер пор и толщина стенки. Замораживание в жидком азоте происходит с высокой скоростью охлаждения, около 50 °С / мин, что приводит к формированию ориентированных участков в структуре губки.

На основе полученных результатов выявлено влияние скорости заморозки на морфологию губок на основе ПВС, что позволяет синтезировать высокопористые материалы с контролируемой структурой для биомедицины.

Работа была поддержана НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1058).

1. Gajra B. et al. Poly vinyl alcohol hydrogel and its pharmaceutical and biomedical applications: A review //Int. J. Pharm. Res. – 2012. – Т. 4. – С. 2026.

2. Konstantinidis A. K. et al. Controlled nucleation in freeze-drying: Effects on pore size in the dried product layer, mass transfer resistance, and primary drying rate //Journal of pharmaceutical sciences. – 2011. – Т. 100. – №. 8. – С. 3453-3470.

3. Assegehegn G. et al. The importance of understanding the freezing step and its impact on freeze-drying process performance //Journal of pharmaceutical sciences. – 2019. – Т. 108. – №. 4. – С. 1378-1395.

Радиобиологический стенд на выведенном пучке ядер углерода из ускорительного комплекса У-70. Возможности и текущее состояние

А.Г. Васильева¹, В.А. Пикалов¹, А.А. Янович¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино

Новейшие клинические исследования в области лучевой терапии показали, что пучки ускоренных ионов углерода являются наиболее совершенным инструментом для лечения онкологических заболеваний [1]. В настоящее время в НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ (далее ИФВЭ) ведутся работы по созданию первого в России Центра ионной терапии [2]. В ИФВЭ освоен вывод ускоренных ионов углерода из ускорительного комплекса У-70. На базе выведенного пучка ионов углерода создана экспериментальная установка с радиобиологическим стендом (далее РБС) для проведения радиобиологических и предклинических исследований, направленных на разработку отечественных методик лечения онкологических заболеваний ускоренными ионами углерода. Данная работа представляет собой обзор текущего состояния РБС, в ней описаны средства транспортировки пучка в зону РБС, а также средства пассивной и активной модификации пучка, приведены характеристики пучка.

На ускорительном комплексе ИФВЭ реализован медленный вывод пучка ионов углерода промежуточных энергий (200-450 МэВ/нуклон) из ускорителя У-70 в экспериментальный зал с РБС. Энергия пучка ионов углерода C^{+6} , его интенсивность, временная структура и другие параметры на данный момент соответствуют необходимым требованиям для медицинского применения и радиобиологических исследований. Создана электромагнитная система формирования равномерного поперечного дозного поля с максимальным размером $15 \times 15 \text{ см}^2$ с неоднородностью не более 5% в месте облучения [3]. Рассчитаны, изготовлены и измерены средства пассивной модификации пучка: гребенчатые фильтры [4] и дегрейдер. Разработано и изготовлено оборудование диагностики пучка и сопровождения облучений: плоскопараллельные ионизационные камеры, матричные плоскопараллельные ионизационные камеры, водяной фантом в 3Д системой перемещения, система видеонаблюдения, средства калибровки ионизационных камер активационными детекторами. Разработано программное обеспечение АСУ установкой РБС.

Совместно со специалистами МРНЦ им. А.Ф. Цыба (Обнинск) и ИТЭБ РАН (Пушино) проводятся радиобиологические исследования и предклинические исследования на действующей установке [3]. В дальнейшем планируется создание экспериментально-клинического центра ионной лучевой терапии с пропускной способностью до 200 пациентов в год.

1. Современные тенденции в мире частиц. Краткие итоги конференции РТСОГ56 / Соловьев А.Н. [и др.] // Радиационная биология. Радиоэкология. 2017. Т. 57. № 5. С. 548-550.
2. Постановление Правительства Российской Федерации от 16.03.2019 №287 «Об утверждении Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы»
3. Формирование поперечно-плоского дозового поля и первые радиобиологические эксперименты на углеродном пучке, выведенном из У-70 / Антипов Ю.М. [и др.] // Приборы и техника эксперимента. 2015. № 4. С. 107-116.
4. Создание специализированного гребенчатого фильтра для получения равномерной биологической дозы на пучке ионов углерода / Соловьев А.Н. [и др.] // Медицинская физика. 2021. Т. 89. № 1. С. 48.

Исследование нейропротекторной активности шаперонов глюкоцереброзидазы на модели *Drosophila melanogaster*

И. М. Голомидов, А. К. Емельянов, Ф. М. Ибатуллин, С. Н. Пчелина, С. В. Саранцева

Федеральное государственное бюджетное учреждение "Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра "Курчатовский институт", Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Ген *GBA1* кодирует лизосомный белок глюкоцереброзидазу (GCase), который гидролизует гликолипид глюкозилцерамид (GlcCer) с образованием глюкозы и церамида. Гомозиготные и компаундные гетерозиготные мутации в *GBA1* вызывают легкую или тяжелую форму болезни Гоше (БГ), при которой из-за низкой активности фермента GCase в органах накапливается его субстрат. В зависимости от тяжести заболевания и неврологического поражения были выявлены три различных типа БГ.

На сегодняшний день ферментозаместительная терапия является эффективным методом лечения БГ I типа, однако данные вещества не способны преодолеть гематоэнцефалический барьер. Привлекательным подходом является использование низкомолекулярных шаперонов. Такие соединения могут преодолевать гематоэнцефалический барьер, связываться с GCase и способствовать правильному фолдингу и доставке фермента в лизосомы. Группой под руководством Ellen Sidransky был идентифицирован новый класс молекул – не ингибирующих низкомолекулярных шаперонов [1]. Соединение NCGC00188758 из данного класса продемонстрировало эффективность в отношении транслокации глюкоцереброзидазы в лизосомы, а также восстановлению активности GCase в фибробластах у пациентов с БГ [2].

Целью нашей работы являлось исследование нейропротекторной активности нового класса шаперонов глюкоцереброзидазы, полученных в ФГБУ ПИЯФ НИЦ КИ «Курчатовский институт» на основе модификаций соединения NCGC00188758 на модели *Drosophila melanogaster*.

У *Drosophila melanogaster* имеется 2 ортолога гена *GBA1* человека: *CG31414* (*GBA1b*) и *CG31148* (*GBA1a*). Они расположены на 3 хромосоме и кодируют белки на 31% и 50% соответственно гомологичные белку человека. Существуют 2 линии *Drosophila melanogaster*, которые содержат вставку мобильного элемента Minos в *CG31414* и *CG31148*. В каждом случае инсерция приводит к преждевременному прекращению синтеза белка. В результате мутантные белки на 129 и 34 аминокислоты короче, чем белок дикого типа [3]. Было показано, что вставка мобильного элемента Minos в *CG31414* вызывает накопление α -гидрокси-GlcCer во всем теле дрозофилы, а также вызывает снижение локомоторной активности, нарушение сна и сокращение продолжительности жизни при нормальных условиях.

Мы проанализировали влияние одного из полученных соединений на уровень нейродегенерации *Drosophila melanogaster*. Полученные данные говорят о том, что новые соединения оказывают положительный эффект в отношении развития нейродегенеративного процесса у *Drosophila melanogaster* *CG31414Mi*. У линии дрозофилы *CG31414Mi*, получавшей низкомолекулярные шапероны, сохранялась повышенная двигательная активность и большее число дофаминергических нейронов.

Работа проводится при поддержке гранта РФФИ № 17-75-20159 «Анализ нейропротекторных свойств фармакологических шаперонов глюкоцереброзидазы».

1. Patnaik S. et al. Discovery, structure–activity relationship, and biological evaluation of noninhibitory small molecule chaperones of glucocerebrosidase //Journal of medicinal chemistry. – 2012. – Т. 55. – №. 12. – С. 5734-5748.
2. Aflaki E. et al. Macrophage models of Gaucher disease for evaluating disease pathogenesis and candidate drugs //Science translational medicine. – 2014. – Т. 6. – №. 240. – С. 240ra73-240ra73.
3. Maor G. et al. The contribution of mutant GBA to the development of Parkinson disease in *Drosophila* //Human molecular genetics. – 2016. – Т. 25. – №. 13. – С. 2712-2727.

Нейровоспаление и когнитивные функции у мышей в отдаленный период после гамма-нейтронного облучения в низких дозах

Жирник А.С., Родина А.В., Высоцкая О.В., Смирнова О.Д., Семочкина Ю.П., Бадретдинов Т.М.

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Фактором риска для работников атомной промышленности и космонавтов при орбитальных и межпланетных космических полётах является воздействие низких доз разных типов ионизирующих излучений. Профессиональное облучение может приводить к развитию отдалённых последствий в виде когнитивных расстройств. Результаты ряда экспериментальных исследований свидетельствуют о повреждении головного мозга и развитии когнитивных нарушений у лабораторных животных в отдалённый период после воздействия протонного излучения [1], облучения α -частицами [2], атомами кислорода [3], кремния [4] и железа [5] в низких дозах. В то же время, количество аналогичных исследований, проведённых с использованием нейтронного излучения, ограничено единичными работами [6, 7]. Изучение механизмов развития отдалённых последствий гамма-нейтронного облучения в низких дозах актуально в связи с развитием ядерной медицины и лучевой терапии и необходимо для разработки способов профилактики и лечения таких осложнений.

Целью работы было исследование нейровоспаления и состояния когнитивных функций у мышей через 2 месяца после пролонгированного гамма-нейтронного облучения в низких дозах.

В экспериментах использовали самцов мышей линии C57BL/6 в возрасте 7–8 недель. Животные содержались в стандартных условиях вивария со свободным доступом к воде и пище (*ad libitum*). Облучение мышей для получения ими поглощённых доз равных 0,05 и 0,5 Гр проводили на установке ОР-М НИЦ «Курчатовский институт» с использованием источника излучения, состоящего из нескольких Pu-Be закрытых радионуклидных источников (мощность поглощённой дозы гамма-нейтронного излучения в контрольной точке составляла $2,13 \times 10^{-3}$ Гр/ч; вклад нейтронов и сопутствующих гамма-квантов в дозу – 75% и 25% соответственно). Через 2 месяца после облучения оценивали поведение (тест «открытое поле»), пространственную память (тест «водный лабиринт Морриса») и эпизодическую память (тест «распознавание нового объекта»). По окончании когнитивных тестов анализировали состояние микроглии в головном мозге и уровень экспрессии генов цитокинов в гиппокампе контрольных и облучённых животных. Статистический анализ данных выполняли с использованием t-критерия Стьюдента. Различия считали статистически значимыми при $p < 0,05$. В каждой экспериментальной группе было по 12 животных.

Анализ параметров теста «открытое поле», таких как общий пройденный путь, средняя скорость, длительность пребывания в пристеночной, промежуточной и центральной зонах арены, количество стоек, позволяет сделать вывод об отсутствии влияния гамма-нейтронного излучения в низких дозах на двигательную активность мышей через 2 месяца после воздействия. Нарушений пространственной памяти у мышей в данный период после гамма-нейтронного облучения в исследованных дозах не было обнаружено: время достижения и количество пересечений платформы и длительность пребывания в «целевом» квадранте не отличались в группах контрольных и облучённых животных.

При проведении теста «распознавание нового объекта» между экспериментальными группами были обнаружены статистически значимые различия в параметрах, характеризующих эпизодическую память. Так, при тестировании через 24 часа после обучения контрольные мыши демонстрировали большее время обследования нового объекта в сравнении со знакомым объектом ($70,2 \pm 2,9\%$ и $29,8 \pm 2,9\%$ соответственно), в то время как мыши, подвергавшиеся воздействию облучения в дозах 0,05 и 0,5 Гр, были неспособны различить новый и представленный ранее в фазе обучения (знакомый) объекты: время обследования было близко к

50%-ному уровню. Индекс распознавания при тестировании у необлучённых животных составил $0,44 \pm 0,07$, а у облучённых в дозах 0,05 и 0,5 Гр – $0,05 \pm 0,03$ и $0,06 \pm 0,05$ соответственно. Полученные данные свидетельствуют о развитии нарушений долговременной эпизодической памяти у мышей через 2 месяца после гамма-нейтронного облучения в низких дозах.

Одним из механизмов наблюдаемых когнитивных нарушений в отдалённый период после облучения может быть повреждение нейронов в результате развития нейровоспаления [8]. Действительно, через 2 месяца после облучения в дозах 0,05 и 0,5 Гр нами обнаружено снижение количества клеток микроглии и увеличение доли активированной микроглии в препаратах клеток мозга мышей, статистически значимые при дозе 0,5 Гр. В гиппокампе облучённых в обеих дозах мышей уровень экспрессии генов провоспалительных цитокинов был повышен в сравнении с контролем. При этом воздействие гамма-нейтронного облучения в дозе 0,5 Гр дополнительно приводило к снижению уровня экспрессии генов противовоспалительных цитокинов.

Таким образом, впервые показано, что пролонгированное гамма-нейтронное облучение в низких дозах (0,5 Гр) приводит к повышению доли активированной микроглии и уровня экспрессии генов провоспалительных цитокинов в мозге, что может свидетельствовать о развитии нейровоспаления, а также к нарушению эпизодической памяти через 2 месяца после облучения при сохранении пространственной памяти.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ от 02.07.2020г. №1059).

1. Parihar V.K., Allen B.D., Tran K.K. et al. Targeted overexpression of mitochondrial catalase prevents radiation-induced cognitive dysfunction // *Antioxid Redox Signal*. 2015. V. 22. No. 1. P. 78-91.
2. Raber J., Torres E.R.S., Akinyeke T. et al. Detrimental Effects of Helium Ion Irradiation on Cognitive Performance and Cortical Levels of MAP-2 in B6D2F1 Mice // *Int J Mol Sci*. 2018. V. 19. No. 4. P. 1247 (1-16).
3. Howe A., Kiffer F., Alexander T.C. et al. Long-Term Changes in Cognition and Physiology after Low-Dose ^{16}O Irradiation // *Int J Mol Sci*. 2019. V. 20. No. 1. P. 188 (1-17).
4. Whooley C.W., Walker A.K., Richardson D.R. et al. Whole-Body Exposure to ^{28}Si -Radiation Dose-Dependently Disrupts Dentate Gyrus Neurogenesis and Proliferation in the Short Term and New Neuron Survival and Contextual Fear Conditioning in the Long Term // *Radiat Res*. 2017. V. 188. No. 5. P. 532-551.
5. Impey S., Jopson T., Pelz C. et al. Short- and long-term effects of ^{56}Fe irradiation on cognition and hippocampal DNA methylation and gene expression // *BMC Genomics*. 2016. V. 17. No. 1. P. 825 (1-18).
6. Yang M., Kim H., Kim J. et al. Fast neutron irradiation deteriorates hippocampus-related memory ability in adult mice // *J Vet Sci*. 2012. V. 13. No. 1. P. 1-6.
7. Mineyeva O.A., Barykina N.V., Bezriadnov D.V. et al. Suppressed neurogenesis without cognitive deficits: effects of fast neutron irradiation in mice // *Neuroreport*. 2019. V. 30. No. 8. P. 538-543.
8. Raber J., Allen A.R., Sharma S. et al. Effects of Proton and Combined Proton and (^{56}Fe) Radiation on the Hippocampus // *Radiat Res*. 2016. V. 185. No. 1. P. 20-30.

Моделирование системы формирования онкофтальмологического протонного пучка циклотрона Ц80 с помощью МК TOPAS

К.С. Красильщиков

Курчатовский комплекс НБИКС-природоподобных технологий, Москва

Проект системы формирования дозовых распределений для онкофтальмологического протонного пучка циклотрона Ц80 основывается на опыте построения аналогичной системы на медицинском протонном пучке синхротрона ИТЭФ, на котором за 30 лет курс протонотерапии получило около 1.5 тысяч онкофтальмологических пациентов. Однако, для того, чтобы удовлетворить современные требования к качеству дозовых распределений, которые нашли отражение в техническом задании на проектирование, потребовались дополнительные исследования, которые, при отсутствии самого протонного пучка, могли осуществляться только методами статистического моделирования (Монте Карло). На начальном этапе для этих целей использовалась МК-программа IThMC, которая разрабатывалась специалистами ИТЭФ (Москва) и ВНИИТФ (Снежинск) в 2008-2010 годах в рамках выполнения гранта МНТЦ. К сожалению, интерфейс этой программы не претерпел изменений с момента создания из-за отсутствия финансирования на развитие этой отечественной разработки и перестал удовлетворять насущным требованиям. Поэтому, пришлось прибегнуть к помощи современной МК-программы TOPAS, которая разрабатывается международным сообществом и имеет развитый интерфейс, специализированный под нужды протонотерапии.

В настоящем докладе представлены результаты, которых удалось достичь за год изучения с нуля и использования данной программы в работах над проектом создания инновационного онкофтальмологического протонного пучка в Гатчине.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ от 02.07.2020г. № 1059).

1. V.I. Kostyuchenko, M.A. Romanycheva, O.B. Ryazantsev, V.G. Khaybullin., S.I. Samarin, A.S. Uglov. Monte Carlo modeling of a horizontal ophthalmologic proton beam line, PTCOG 48 presentation 2009
2. Perl, Shin J, Schümann J, Faddegon B, Paganetti H. TOPAS – an innovative proton Monte Carlo platform for research and clinical applications. Med Phys 2012;39:6818–37. PMID: 23127075.

Молекулярный дизайн и синтез прекурсоров для конструирования таргетных радиофармпрепаратов

Е.Р. Малютина^{1,2}, А.В. Колотаев^{2,3}, Е.А. Чигорина^{2,3}, В.Н. Осипов², Д.С. Хачатрян^{2,3}

¹*Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева, Миусская площадь, 9, Москва, 125047, Россия*

²*НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, Богородский вал, 3 Москва, 107076, Россия*

³*НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова, 1, Москва, 123182, Россия*

В настоящее время остаётся актуальным поиск коротких пептидов-аналогов гормона соматостатина (SST) для использования их в качестве векторных молекул для таргетной доставки радиофармпрепарата (РФП) непосредственно к опухолевой клетке благодаря гиперэкспрессии на ней рецепторов SST [1]. Это дает возможность применять такие препараты в качестве более селективных агентов с меньшим агрессивным действием на здоровые клетки и таким образом обойти множественную лекарственную устойчивость (МЛУ), которая характерна для злокачественных образований [2]. Нами были разработаны различные прекурсоры для конструирования таких РФП [3]. В основе их структуры лежат: тетрапептид (Phe-D-Trp-Lys(Boc)-Thr), который является аналогом гормона соматостатина и используется в качестве вектора, этилендиамин как линкер и хелатор – DOTA (1,4,7,10-тетраазациклододекан-1,4,7,10-тетрауксусная кислота). Также были использованы различные дополнительные аминокислоты, например, тиазолидин-4-карбоновая кислота в качестве агента, повышающего цитотоксическое действие конъюгата, или лизин и пролин в качестве дополнения к основному пептиду для изучения и сравнения свойств тетра- и пентапептидов.

Работа выполнена в рамках ВНИР 2021 от 01.02.2021 НИЦ "Курчатовский институт"-ИРЕА. Аналитические исследования выполнены с использованием научного оборудования ЦКП НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА.

1. Overview of Radiolabeled Somatostatin Analogs for Cancer Imaging and Therapy / Eychenne R. [et al.] // *Molecules*. 2020. Vol. 25(17). P. 4012.
2. Северин Е. С., Родина А. В. Проблемы и перспективы современной противоопухолевой терапии // *Успехи биологической химии*. 2006. №. 46. С. 43-64.
3. From octreotide to shorter analogues: Synthesis, radiolabeling, stability / Yakusheva A. [et al.] // *J. Labelled Comp. and Radiopharm.* 2019. Vol. 62(11). P. 718-728.

Система дозиметрического планирования лучевой терапии на пучке протонов 1000 МэВ

Н.И. Мамедова¹, Ф.А. Пак¹

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

В медицинском протонном комплексе (МПК) на базе синхроциклотрона СЦ-1000 НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ разработана и внедрена технология протонной лучевой терапии (ПЛТ) малых внутричерепных мишеней при энергии протонов 1000 МэВ. Облучение осуществляется узким пучком протонов методом «напролет». Столь высокая энергия протонов исключает возможность использования системы гантри, поэтому изоцентрическое облучение реализуется с помощью двухосевой ротации элементов терапевтической установки. Дозовые поля, полученные таким образом, характеризуются высоким краевым градиентом дозы. В зависимости от программы облучения можно формировать дозовые распределения различной формы и размера таким образом, чтобы планируемая мишень была охвачена поверхностью заданной изодозы, а доза в прилегающих тканях и критических структурах не превышала соответствующие толерантные уровни.

Всего с 1975 г. по настоящее время в МПК было проведено 1394 сеанса ПЛТ. Самый большой опыт накоплен при лечении пациентов с различными видами аденом гипофиза и мальформаций сосудов головного мозга. Положительные результаты, достигнутые при клиническом применении протонного пучка с энергией 1000 МэВ на внутричерепных опухолях и патологиях, привели к решению о развитии дальнейшего использования данной методики. С целью возобновления ПЛТ на базе СЦ-1000 была запущена программа по модернизации оборудования в соответствии с современными требованиями качества для повышения надежности проводимых процедур [1]. Отдельного внимания заслуживает дозиметрическое планирование облучения. Ранее данный этап осуществлялся на основе экспериментальных данных с наложением изодозовых кривых на МР-снимки пациентов [2] в плоскостях, проходящих через изоцентр. Это ограничение не позволяет оценивать дозу на других срезах из того же набора данных и может сужать возможности анализа плана облучения.

Для расширения возможностей планирования облучения была разработана компьютеризированная система дозиметрического планирования. В настоящем докладе будет представлен основной функционал разработанной системы планирования, а также описан алгоритм расчета дозы с учетом метода Монте-Карло для пучка протонов с энергией 1000 МэВ, применяемого для ПЛТ.

1. Брожик Д.С. и др. Статус медицинского протонного комплекса НИЦ «Курчатовский институт»–ПИЯФ // Препринт ПИЯФ. – 2020. – № 3045. – 48 с.
2. Шалек Р.А. Протонная терапия кортикотропином на 1000 МэВ синхроциклотроне // Дисс. ... канд. мед. наук. Спб. – 1997. – 129 с.

Получение медицинского радионуклида тербия-155 и меченых им пептидов

А.Н. Мусеева¹, Р.А. Алиев¹, В.Н. Осипов², Д.С. Хачатрян^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский Институт», г. Москва

²НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, г. Москва

В настоящее время проводится большое количество исследований, направленных на применение четырех радиоизотопов тербия, ¹⁴⁹Tb, ¹⁵²Tb, ¹⁵⁵Tb и ¹⁶¹Tb, в ядерной медицине. Данные изотопы обладают привлекательными ядерными характеристиками и имеют потенциал для использования в тераностике, которая объединяет терапевтические и диагностические радиоизотопы. Основная проблема использования этих радиоизотопов в медицине – трудность производства их в достаточном количестве.

Изотоп ¹⁵⁵Tb ($T_{1/2} = 5,32$ д, ϵ) испускает мягкое гамма-излучение ($E_{\gamma} = 87$ keV (32%) 105 keV (25%)) и рассматривается в качестве ОФЭКТ-аналога терапевтических радиолантанидов ¹⁷⁷Lu, ¹⁴⁹Tb, ¹⁶¹Tb, ¹⁶⁶Ho [1]. Однако в настоящее время ни циклотронные, ни реакторные методы наработки радионуклидов не подходят для крупномасштабного производства ¹⁵⁵Tb [2]. Единственный метод получения данного изотопа, подходящего для биологических и медицинских исследований, – реакция скалывания танталовой мишени при облучении её протонами с энергией 1.4 ГэВ с последующим выделением ¹⁵⁵Tb методом масс-сепарации на установке ISOLDE (CERN) [1] с дальнейшей очисткой от изобар и псевдо-изобар. Тем не менее, ввиду уникальности данной установки, этот опыт вряд ли может быть использован в других организациях.

В данной работе предложен новый метод получения медицинского радиоизотопа тербия-155 посредством облучения гадолиниевой мишени природного изотопного состава альфа-частицами с энергией 60 МэВ. Производство данного изотопа в основном происходит через образование промежуточного нуклида ¹⁵⁵Dy ($T_{1/2} = 9,9$ ч), который полностью распадается в ¹⁵⁵Tb. Для очистки от примесей была проведена двухэтапная хроматография. На колонке с сорбентом LN Resin при разной концентрации HNO₃ Gd, Tb и Dy имеют принципиально разный коэффициент удерживания. В результате радиохимический выход диспрозия при загрузках 2 и 20 мг/г составил 96 ± 2 %. Радиоизотопов Gd и Tb в диспрозиевой фракции при первичном разделении обнаружено не было (верхняя оценка – ~0.1% от введенного количества).

С очищенной фракцией ¹⁵⁵Tb были проведены эксперименты по мечению аналога функциональной группы соматостатина, тетрапептида Phe-D-Trp-Lys-Thr, конъюгированного с хелатором DOTA. Подробный способ получения данного конъюгата описан в [3]. Было проведено два эксперимента с соотношением металл-лиганд 1:500, и отношением 1:4 соответственно. Степень связывания составила $98,5 \pm 4,0$ % для соотношения металл-лиганд 1:500 и $96,6 \pm 4,0$ % для соотношения 1:4. Устойчивость данного комплекса была исследована *in vitro* в физрастворе и в сывороточном белке. Результаты проведенных экспериментов согласуются с данными для других конъюгатов с DOTA, которые показывают, что комплексы DOTA сохраняют высокую кинетическую стабильность даже после их конъюгирования с пептидами.

1. Müller C. et al. Future prospects for SPECT imaging using the radiolanthanide terbium-155 - production and preclinical evaluation in tumor-bearing mice // Nucl. Med. Biol. 2014. Vol. 41, № S. P. 58–65.
2. Naskar N., Lahiri S. Theranostic Terbium Radioisotopes: Challenges in Production for Clinical Application // Front. Med. 2021. Vol. 8, № May. P. 1–11.
3. Yakusheva A. et al. From octreotide to shorter analogues: Synthesis, radiolabeling, stability // J. Label. Compd. Radiopharm. 2019. Vol. 62, № 11. P. 718–728.

Инновационная концепция экстракорпоральной поддержки плода

Н.С. Мордвинов

Ульяновский Государственный Университет, Ульяновск

Проблема спонтанного прерывания беременности и преждевременных родов одна из самых актуальных в современной медицине. По оценкам ВОЗ, проблема бесплодия касается от 48 до 186 миллионов пар в мире. Наблюдается увеличение числа женщин с диагностируемым абсолютным и относительным бесплодием, с патологией периода вынашивания (внематочная беременность, токсикоз, эклампсия, преэклампсия), с патологией периода родов (синдром Шихана и Симондса, аномальные предлежания, слабость и дискоординированность родовой деятельности). По оценкам ВОЗ, проблема бесплодия касается от 48 до 186 миллионов пар в мире.

Провести анализ имеющихся разработок и сформировать концепцию для создания наиболее оптимальных подходов, обеспечивающих альтернативу естественной беременности.

Нами была разработана трехэтапная теоретическая модель “Экзоматки”, позволяющая обеспечить наиболее оптимальные условия для экстракорпорального вынашивания плода, которая включает следующие этапы:

Этап №1. Классическая процедура экстракорпорального оплодотворения. Начата отработка методики дифференцировки МСК клеток в эндометрий и пилотное обследование беременных женщин для уточнения определения гормонального состава амниотической жидкости и крови в разные периоды беременности. Планируются эксперименты с инвагинацией зиготы в культуру клеток.

Этап №2. Развитие эмбриона в культуре клеток - матрикс в культуре заменять примитивную энтодерму, обеспечивая поляризацию клеток эпибласта и формирование полости. Связи между клетками осуществляются через трехмерные внеклеточные структуры из коллагенового матрикса. На 5 день развития эмбриона происходит подсадка в культуру маточного эндотелия. Процесс развития эмбриона в культуре клеток продолжается до 10- 11 недели. Замена питательной среды осуществляется каждый день. К моменту переноса эмбриона в полость экзоматки на культуре клеток будут сформированы нормально функционирующие внезародышевые органы, продолжает свое развитие вторичная кровеносная система. Планируется постановка методики выделения эмбриона из полости амниотического пузыря с последующей катетеризацией пупочных сосудов. *Этап №3.* Трансплантация эмбрионов. Сам процесс переноса эмбриона в полость “Экзоматки” предполагает последовательный, четкий и в значительной степени ограниченный по времени комплекс манипуляций, включающий: амниоцентез с последующей кроссекцией, выделение, лигирование и резекцией пуповины, для последующего катетеризации обеих артерий и вены. К артериям подключается система инфузوماتов для дозированного введения смеси растворов, обогащенной питательными веществами и очищенной с помощью гемодиализной системы, подключенной в свою очередь к пупочной вене. Стенка же самой экзоматки выполнена из прозрачного полиакриламида, в которой имеются следующие системы: артериовенозный контура без помпы, для введения и вывода питательных веществ и их метаболитов; замкнутая жидкостная среда с постоянным обновлением синтетической амниотической жидкости; искусственной пуповина “Экзоматки” с возможностью постоянного контроля за системой пуповинных сосудов.

Таким образом создание подобной системы экстракорпоральной поддержки плода могло бы решить большое количество проблем как вынашивания, так и зачатия, что в свою очередь обеспечило бы всех людей полноценным репродуктивным здоровьем, а также устранило бы давнюю проблему многих женщин “ребенок или карьера”.

1. Coleman Stephen. The Ethics Of Artificial Uteruses: Implications For Reproduction And Abortion. Burlington: Ashgate Pub., 2004.
2. Scott Gelfand, John R. Shook. Ectogenesis: Artificial Womb Technology and the Future of Human Reproduction. Amsterdam: Rodopi, 2006.

Информационные технологии для проведения протонной лучевой терапии

В.О. Карпунин¹, Д.Г. Орлов¹

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

Протонная лучевая терапия – метод дистанционной лучевой терапии лечения пациентов со злокачественными новообразованиями, доказавший свою эффективность многолетней практикой [1]. В основу метода положено конформное облучение: формирование дозового распределения в теле пациента, обеспечивающего формирование равномерного изодозового объема, конформно совмещенного с мишенью-опухолью, с достижением минимальной дозовой нагрузки на здоровые ткани, особенно в критических структурах организма, существенных для качества жизни пациента после успешного достижения локального контроля новообразования.

Технологический процесс протонной терапии включает ряд этапов проведения:

- получение топометрических данных, с возможной иммобилизацией пациента,
- планирование облучения, выполнение которого позволит сформировать дозовое распределение и совместить его заданным образом с телом пациента
- верификация плана облучения, включающая верификацию сформированного дозового распределения, и при необходимости симуляционную укладку/усадку пациента на лучевой установке.
- собственно, облучение пациента.

Облучение происходит в несколько этапов – фракций, при этом может происходить изменение в новообразовании, что потребует повторного проведения последовательности приведенных этапов.

С первого этапа возникает необходимость получения, хранения и обработки больших объемов данных, что изначально было сопряжено с существенными материальными и временными затратами. Отдельным вопросом стоит контроль средств автоматизации выполнения технологического процесса, для которого существенным моментом является субъект – пациент. Развитие вычислительной техники позволило решить вопрос хранения данных. В современном диагностическом оборудовании автоматизирован процесс получения топометрических данных. Но обработка данных до последнего времени продолжала требовать кропотливой работы специалиста. Программное обеспечение предоставляло инструменты, упрощающие сам процесс, но все так же, требующего опытных специалистов, постигших искусство их использования.

Сейчас происходит освоение новых нейронных алгоритмов, так и продолжающееся развитие применения GPU (видеокарт рабочих станций) для ускорения расчётов [2,3]. Это не только позволит еще больше переложить рутинные операции на оборудование, но и повысить эффективность проведения лучевой терапии, как по времени проведения этапов, так и результату, что должно вследствие улучшить качество жизни пациента.

Мы рассмотрим как уже привычные средства информационных технологий, так и только осваиваемые специалистами.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ от 02.07.2020 г. № 1059).

7. В.С. Хорошков, Д.А. Жидков, Г.И. Кленов, В.Н. Кончиков, К.А. Сергунова, А.Н. Черных, «Техника протонной лучевой терапии в мире и в России вчера, сегодня, завтра» // Медицинская физика, №1(89), 2021, с.81-86.
8. А. А. Егоров, С. А. Лысенкова, К. В. Мазайшвили. Свёрточные сети для сегментации изображений крупных вен // Вестник КРАУНЦ. Физико-математические науки. – 2020. – Т. 31. – № 2. – С. 117-128. – DOI 10.26117/2079-6641-2020-31-2-117-128.
9. Параллельное вычисление с использованием технологии CUDA. Распараллеливание исходной задачи / С. Я. Егоров, С. В. Абрамов, С. М. Терехов, В. Н. Дружинина // Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. – 2014. – № 6(65). – С. 49-51.

Реакция орксинергической системы мозга на введение суперантигена – стафилококкового энтеротоксина В

Е.Э. Нестерко, А.С. Дятлова

ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины»

Стафилококковый энтеротоксин В (SEB) относится к семейству суперантигенов, механизм действия которых является Т-зависимым, но при этом попадание в организм даже малых доз такого антигена вызывает неспецифическую поликлональную активацию и пролиферацию большого числа Т-лимфоцитов (до 20%) за счет высокого сродства к β-цепям некоторых типов Т-клеточных рецепторов [1]. Кроме того, SEB вызывает гиперактивацию клеток врожденного иммунитета, связываясь с МНСII на поверхности антиген-презентирующих клеток [2].

Одной из важнейших структур мозга, регулирующих интенсивность реакций иммунной системы, является гипоталамус. Локализованная в нем система орксин-содержащих нейронов активируется в ответ на введение в организм антигенов различной природы, таких как Т-независимый антиген – липополисахарид, или Т-зависимый антиген – бычий сывороточный альбумин. При этом паттерн активации орксинергической системы гипоталамуса зависит от типа вводимого антигена [3]. До настоящего времени не проводилось исследований реакции орксинергической системы гипоталамуса на введение суперантигенов, в связи с чем целью данного исследования явилось определение степени активации орксин-содержащих нейронов гипоталамуса на введение стафилококкового энтеротоксина В.

8 самцов крыс линии Wistar массой 200-250 г, содержащихся в условиях вивария при температурном режиме 23°C и 12-часовом цикле освещения день/ночь, были разделены на равные (n=4) экспериментальные группы с интраперитонеальным введением SEB (в дозе 500 мкг/кг) и PBS (контроль) в равном объеме (100 мкл). Через 4 часа животных наркотизировали и проводили транскардиальную перфузию физиологическим раствором с последующей фиксацией 4% раствором параформальдегида (ПФА). Далее извлекали головной мозг, осуществляли постфиксацию в 4% ПФА в течение суток, после чего осуществляли проводку материала и изготавливали фронтальные срезы головного мозга (30 мкм) на замораживающем микротоме Reichert 328866 с использованием 20% раствора сахарозы в качестве криопротектора. Для выявления орксин-позитивных нейронов гипоталамуса использовали авидин-биотиновую модификацию иммуногистохимического метода с использованием поликлональных кроличьих антител к орксину А («Abscam», 1:4000). Для визуализации иммуногистохимического окрашивания использовали диаминобензидин. Выявление орксин-позитивных нейронов проводили с использованием 10-кратного увеличения светового микроскопа на срезах, соответствующих 27 и 28 уровням мозга [4], содержащих наибольшее количество орксинергических нейронов. Подсчет количества и уровня относительной оптической плотности (ООП) орксин-позитивных нейронов осуществляли при помощи программного обеспечения «ВидеоТест - Морфология 5.2». Расчет ООП производили по следующей формуле: $ООП = \text{оптическая плотность нейронов} / \text{оптическая плотность фона}$. Подсчет вели главным образом в дорсомедиальном ядре гипоталамуса (DMH) и зонах латеральной части гипоталамуса (LHA): LHA_{jd}, LHA_s, LHA_d, LHA_{vm}.

Статистическую обработку производили с использованием программного обеспечения GraphPad Prism, для анализа данных использовали U-критерий Манна-Уитни. Различия считали достоверными при уровне значимости $p < 0,05$.

Установлено, что орксинергическая система реагирует увеличением количества орксин-позитивных нейронов на введение стафилококкового энтеротоксина В через 4 часа после инъекции. Количество орксин-позитивных нейронов повышается в 1,5 раза по сравнению с контролем на 27 уровне и в 3 раза по сравнению с контролем на 28 уровне в соответствии с атласом мозга крысы ($p < 0,05$).

Относительная оптическая плотность орксин-позитивных нейронов на 27 уровне среза мозга не изменяется, а на 28 уровне повышается в 1,3 раза у животных, которым вводили SEB ($p < 0,05$).

Таким образом, в данном исследовании впервые установлено что орксинергическая система гипоталамуса отвечает двукратным увеличением количества и относительной оптической плотности орксин-позитивных нейронов на введение стафилококкового энтеротоксина В в дозе 500 мкг/кг через 4 часа после его интраперитонеального введения. Ранее подобных исследований не проводилось, однако известно, что введение SEB вызывает активацию дорзального вагального комплекса [5], который имеет афферентные проекции на ядро PVN гипоталамуса [6]. Можно предположить, что ганглии и ядра продолговатого мозга являются первыми интегративными центрами на пути передачи висцеросенсорной информации в ЦНС, в то время как орксинергическая система, являются следующим, центральным звеном обработки информации об антигене.

1. Krakauer T. Staphylococcal Superantigens: Pyrogenic Toxins Induce Toxic Shock // *Toxins*. 2019. № 3 (11). P. 178.
2. Krakauer T. FDA-approved immunosuppressants targeting staphylococcal superantigens: mechanisms and insights // *ImmunoTargets and Therapy*. 2017. (6). P. 17–29.
3. Перекрест С.В., Гаврилов Ю.В., Абрамова Т.В., Новикова Н.С., Корнева Е.А. Активация клеток гипоталамических структур при введении антигенов раз-личной природы (по экспрессии c-Fos гена) // *Медицинская иммунология*. - 2006. - Т.8. - № 5-6. - С. 631-636.
4. Swanson LW. Brain maps 4.0-Structure of the rat brain: An open access atlas with global nervous system nomenclature ontology and flatmaps. *J Comp Neurol*. 2018. Vol. 526(6). P. 935-943.
5. Wang X, Wang B.R., Zhang X.J. et al. Fos expression in the rat brain after intraperitoneal injection of Staphylococcus enterotoxin B and the effect of vagotomy // *Neurochemical Research*. 2004. № 9 (29). P. 1667–1674.
6. Affleck V.S., Coote J.H., Pyner S. The projection and synaptic organisation of NTS afferent connections with presympathetic neurons, GABA and nNOS neurons in the paraventricular nucleus of the hypothalamus // *Neuroscience*. 2012. Vol. 219(1-2). P. 48-

Исследование безопасных методов блокировки протонного пучка при проведении протонной лучевой терапии онкоофтальмологическим пациентам

Д.А. Жидков¹

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Процесс терапевтического облучения меланомы глаза сопряжён с рисками, требующими наличия технологии блокировки пучка [1] в считанные доли секунды. Регулирование подачи протонного пучка непосредственно на трассе является самым простым решением, однако подобные манипуляции могут исказить равномерное поле облучения и потребовать значительного количества времени на стабилизацию протонного пучка и его калибровки, с вынужденной необходимостью выводить пациента из процедурного помещения. Учитывая специфику онкоофтальмологического облучения, при котором не только медицинские физики, но и сам пациент отвечает за правильность процесса облучения, удерживая взгляд в строго фиксированном положении, возникает риск случайного отвода взгляда и нарушения процесса облучения. Во избежание травмирования здоровых тканей пациента необходимо блокировать пучок мгновенно. При этом не терять исходного подготовленного и верифицированного протонного пучка [2]. При начале облучения также необходимо удостовериться, что параметры пучка строго соответствуют заказанным медицинским персоналом.

Для решения этой задачи предлагается использовать устройство выполняющее роль сверхбыстрой автоматизированной заслонки или шаттера, которое физически перекрывает протонный пучок непосредственно перед пациентом и при этом даёт возможность анализировать состояние протонного пучка установленным на оптической скамье оборудованием [3].

Однако возникают серьёзные опасения того, что при перекрытом пучке, протоны будут создавать вторичные частицы, в частности быстрые нейтроны, способные значительно повысить общую дозу радиационного облучения на пациента, в частности на критические органы, как сетчатка глаза и головной мозг.

В данной работе исследованы две принципиальные схемы устройства блокировки медицинского протонного пучка с использованием заслонки на шаговых двигателях и линейных двигателях, необходимых в рутинной работе онкоофтальмологического центра протонной лучевой терапии. Исследованы различные материалы, используемые для перекрытия протонного пучка, создающие наименьшее количество вторичных частиц и при этом наиболее лёгкие по весу. С помощью метода Монте-Карло в пакете Fluka исследованы различные формы заслонок и принципы перекрытия медицинского протонного пучка для определения наиболее быстрого варианта, не создающего горячих (переобученных) зон в области мишени.

[1] P.Hofverberg, J.-M.Bergerot, R.Trimaud, J.Hérault The development of a treatment control system for a passive scattering proton therapy installation, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A 1002, 2021

[2] Лебедева Ж.С. Распределения доз для протонной онкоофтальмологии на циклотроне Ц-80, Медицинская физика, 2(2016), 25

[3] Кленов Г.И., Черных А.Н., Стенд для протонной онкоофтальмологии, Медицинская физика, 2(2016), 18

Повышенный уровень аутофагии в клетках пациентов с мутацией в гене *GBA* (бессимптомных носителей и с *GBA*-ассоциированной болезнью Паркинсона)

А.Д. Изюмченко¹, М.А. Николаев^{1,2}, А.Э. Копытова¹, Д.А. Богданова¹, Е.В. Грачева³, И.В. Милюхина³, А.К. Емельянов¹, С.Н. Пчелина^{1,2}

² ПИЯФ им Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский Институт», Гатчина, Россия

³ ПСПБГМУ им И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

Глюкоцереброзидаза(GCase)-фермент, который кодируется геном *GBA*, и отвечает за расщепление глюкозилцерамида и глюкозилсфингозина. Мутации в гене *GBA* являются фактором высокого риска развития болезни Паркинсона(БП)[1], так как мутация в этом гене приводит к экспрессии неправильно свернутого фермента, что, в свою очередь, ведёт к стабилизации и накоплению олигомерных форм альфасинуклеина[2]. Как было показано ранее, наличие мутаций в гене *GBA* приводит к нарушению процесса аутофагии[3]. Аутофагия является естественным, регулируемым механизмом клетки, который разбирает ненужные или дисфункциональные компоненты[4]. Шаперон-зависимая аутофагия способна выводить из клетки олигомерные формы альфа-синуклеина, тем самым оказывая протективное воздействие.

Цель: оценить влияние мутаций в гене *GBA* на аутофагию в клетках пациентов с *GBA*БП и у бессимптомных носителей *GBA* и сравнить с контрольной группой.

Исследование было проведено на макрофагах периферической крови у бессимптомных носителей мутации *GBA* (N=4), у пациентов с *GBA*ассоциированной болезнью Паркинсона (*GBA*-БП)(N=4) и у лиц контрольной группы(N=6). У каждого человека была получена мононуклеарная фракция из 18 мл свежесобранной цельной крови методом градиентного центрифугирования в растворе Фиколла(p=1.077, GE Healthcare UK Limited, UK) при 1600 об/мин по методике(Boyum, 1968) и дважды отмыты PBS с последующим центрифугированием при 3000 об/мин в течение 10 минут. Полученные мононуклеарные клетки ресуспендировали в культуральной среде (RPMI Medium, Gibco, USA) и культивировали по протоколу(Nikolaev M. et al. Tsitologiya. 2018. 60 (12):1022-1028) с добавлением 10% FBS(БиолоТ, Россия), 1% стрептомицин-пенициллина (Penicillin Streptomycin, Gibco, USA)) с добавлением колониестимулирующего фактора макрофагов М-КСФ(М-CSF Gibco, USA) в конечной концентрации 10 нг/мл в течение 4 суток в 5% CO₂-инкубаторе при +37°C с ежедневной заменой среды. Созревание макрофагов было подтверждено с помощью световой микроскопии. Определение аутофагии проводилось с использованием набора Autophagy Detection kit (ab139484, Abcam, UK) по протоколу производителя. Анализ образцов проведен на проточном цитометре FC500 BeckmanCoulter (США) с использованием лазерного источника длиной волны 488 нм (в зеленом канале FL1).

В исследуемых группах по результатам проточной цитометрии нами было выявлено повышенное значение флуоресценции спонтанной аутофагии в макрофагах периферической крови *GBA*-носителей(14.4 (10,5-16,2) MIF) и пациентов с *GBA*-БП(15.6 (12,1-17,5) MIF) по сравнению с контрольной группой(11.2 (6,2-13,0) MIF)(p=0.042, p=0.012, соответственно). Высокие показатели флуоресценции свидетельствует о нарушении аутофагии на поздней стадии. Схожие результаты были получены на мышцах[5]. Таким образом, наш результаты подтверждают, что активация аутофагии может нарушать каскад обратной связи БП[6].

Исследование поддержано грантом РФФ 19-15-00315.

1. Westbroek W., Gustafson A. M., Sidransky E. Exploring the link between glucocerebrosidase mutations and parkinsonism //Trends in molecular medicine. – 2011. – Т. 17. – №. 9. – С. 485-493.
2. Behl T. et al. Cross-talks among *GBA* mutations, glucocerebrosidase, and α -synuclein in *GBA*-associated Parkinson's disease and their targeted therapeutic approaches: A comprehensive review //Translational Neurodegeneration. – 2021. – Т. 10. – №. 1. – С. 1-13.
3. Schöndorf D. C. et al. iPSC-derived neurons from *GBA1*-associated Parkinson's disease patients show autophagic defects and impaired calcium homeostasis //Nature communications. – 2014. – Т. 5. – №. 1. – С. 1-17.
4. Huang J., Klionsky D. J. Autophagy and human disease //Cell cycle. – 2007. – Т. 6. – №. 15. – С. 1837-1849.
5. Li H. et al. Mitochondrial dysfunction and mitophagy defect triggered by heterozygous *GBA* mutations //Autophagy. – 2019. – Т. 15. – №. 1. – С. 113-130.
6. Taguchi Y. V. et al. Glucosylsphingosine promotes α -synuclein pathology in mutant *GBA*associated Parkinson's disease //Journal of Neuroscience. – 2017. – Т. 37. – №. 40. – С. 96179631.

Уровень цитокина IL-17 и структурные изменения мозга при шизофрении

И.К. Малашенкова^{1,2}, В.Л. Ушаков³, С.А. Крынский¹, Д.П. Огурцов¹, Н.А. Хайлов¹, Е.И. Чекулаева¹, Н.А. Дидковский²

¹НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

²ФГБУ ФНКЦ физико-химической медицины, Москва

³ГБУЗ г. Москвы «Психиатрическая клиническая больница №1 им. Н.А. Алексеева» ДЗМ

Шизофрения (ШЗ) - хроническое психическое расстройство, которое вызывается сложной палитрой генетических, эпигенетических и повреждающих факторов окружающей среды. Большой интерес представляют данные, показывающие критическую роль иммунных нарушений и нейровоспаления в патогенезе различных форм шизофрении. В литературе обсуждается также и ряд доказательств роли системного воспаления в патогенезе этого заболевания [1].

Многие работы с использованием МРТ показывают у больных шизофренией выраженные в различной степени структурные изменения объема, серого вещества, белого вещества и нарушения функциональной активности лобной доли, но механизмы, лежащие в основе этих изменений, еще полностью не изучены [2]. При этом у одних больных изменения незначительны или отсутствуют, в то время как у некоторых они выражены заметно больше. Также надо отметить противоречивость результатов нейровизуализации с помощью МРТ у разных авторов [3]. До настоящего времени нет общепринятых подходов к использованию данных нейровизуализации для прогнозирования психоза, постановки диагноза шизофрении, подбора терапии заболевания и его мониторинга. Одним из важных путей к трансляции данных МРТ в клиническую практику является изучение взаимосвязей между структурными нарушениями мозга и уровнем имеющих взаимосвязь с клинической картиной иммуновоспалительных маркеров у больных шизофренией.

IL-17A – провоспалительный цитокин, продуцируемый активированными лимфоцитами, включая CD4+, CD8+, $\gamma\delta$ -T, и другими иммунными клетками. IL-17A активирует транскрипционный фактор NF- κ B и митоген-активируемые протеинкиназы, вызывая экспрессию медиаторов системного воспаления: IL-1 β , IL-6, циклооксигеназы-2, а также оксида азота. Т-хелперы, продуцирующие IL-17A (Th17 клетки), синтезируют также воспалительные медиаторы IL-22, IL-23, GV-CSF и ряд хемокинов. IL-17A вместе с IL-6 и IL-1 β и другими медиаторами участвуют в тканевом воспалении, в аутоиммунной патологии, и, в частности, IL-17A может проникать в ткань мозга.

Высокий уровень IL-17A в крови отмечается при ряде хронических воспалительных заболеваний: ревматоидный артрит, псориаз, рассеянный склероз. В отдельных работах изучается роль IL-17A в патогенезе шизофрении и взаимосвязь уровня этого цитокина с клиническими характеристиками заболевания. По данным Chen et al., у нелеченных пациентов с первым психотическим эпизодом уровень IL-17 повышен и не снижается через 10 недель после терапии [4]. Анализ литературы показывает, что практически не изучено возможное значение IL-17A в поражении мозга при ШЗ.

Цель исследования: - изучение взаимосвязей между уровнем IL-17A и результатами структурной нейровизуализации для оценки возможной его роли в поражении мозга при шизофрении.

В исследование вошли 60 человек, больных шизофренией (29 мужчин, 31 женщина, средний возраст – 29,14 \pm 1,83 лет). 85 человек без когнитивных нарушений (31 мужчина, 54 женщины), сопоставимых с пациентами с шизофренией по полу и возрасту, набраны в контрольную группу. Их средний возраст составил 27,5 \pm 4,2 года, от 23 до 33 лет. Определяли уровень IL-17A методом ELISA. МРТ-исследование проводилось с использованием прибора Magnetom Verio 3T (Siemens, Germany), анатомические данные высокого разрешения получали на основе T1-взвешенных изображений.

Уровень IL-17A в среднем у больных шизофренией не был изменен. Анализ взаимосвязи сывороточного уровня цитокина IL-17A у больных с результатами структурной визуализации выявил следующие результаты. У больных с уровнем IL-17A > 5 пг/мл был достоверно снижен по сравнению с контролем показатель средней толщины в зонах левого полушария: в области левой латеральной орбитофронтальной извилины (p=0,002), орбитальной части левой нижней лобной извилины (ЛНЛИ) (p=0,00008), треугольной части ЛНЛИ (p=0,006), ростральной части левой средней лобной извилины (p=0,002), левой верхней лобной извилины (p=0,0007). Кроме того, у данных пациентов имело место достоверное снижение средней толщины в следующих зонах правого полушария: нижней височной извилине (p=0,001), латеральной орбитофронтальной извилине (p=0,003), покрышечной части правой нижней лобной извилины (ПНЛИ) (p=0,001), орбитальной части ПНЛИ (p=0,005), треугольной части ПНЛИ (p=0,0006), ростральной части правой средней лобной извилины (p=0,004), правой верхней лобной извилины (p=0,00003). Ряд указанных зон принимают участие в речевых функциях и регуляции влечений.

Приведенные данные указывают на возможную роль IL-17 в развитии структурных нарушений отдельных зон мозга при шизофрении.

Проведение исследования одобрено Этическим комитетом НИЦ «Курчатовский Институт», протокол от 11.03.2021.

Работа выполнена при поддержке Национального исследовательского центра «Курчатовский Институт» (приказ № 1361 от 25 июня 2019 г.).

1. Müller N., Krause D., Weidinger E., Schwarz M. [Immunological treatment options for schizophrenia] [Article in German] // Fortschr Neurol Psychiatr. – 2014. – Vol. 82, № 4. – P. 210-9.
2. Birur B., Kraguljac N.V., Shelton R.C., Lahti A.C. Brain structure, function, and neurochemistry in schizophrenia and bipolar disorder - a systematic review of the literature on magnetic resonance neuroimaging // NPJ Schizophr. – 2017. – Vol. 3, No 3. – P. 15.
3. Malashenkova I.K., Ushakov V.L., Krynskiy S.A., Ogurtsov D.P., Khailov N.A., Zakharova N.V., Chekulaeva E.I., Orlov V.A., Kartashov S.I., Andreyuk D.S., Didkovsky N.A., Kostyuk G.P. The relationship of morphometric changes of the brain with IL-6 levels, systemic inflammation and immune disturbances in the patients with schizophrenia // Procedia Computer Science. – 2021. – Vol. 190. – P. 553–559.
4. Chen D., Li H., Zhao Q., Song J., Lin C., Yu J. Effect of risperidone treatment on insulin-like growth factor-1 and interleukin-17 in drug naïve first-episode schizophrenia // Psychiatry Res. – 2021. – Vol. 297. – P. 11371

Развитие протонной лучевой терапии в НИЦ "Курчатовский институт" и НИЦ "Курчатовский институт" — ПИЯФ

*Максимов В.И.¹, Иванов Е.М.¹, Гранин Д.И.¹,
Хорошков В.С.², Кленов Г.И.², Черных А.Н.²*

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

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Доклад посвящен краткому историческому обзору и тенденциям развития протонной лучевой терапии (ПЛТ) в мире [1]. Также рассматривается положение с этим видом медицинской помощи в России. Отмечается, что вслед за США и Швецией – пионерами этой новой тогда области применения заряженных частиц для воздействия на злокачественные новообразования, в 1968 г. исследования начались в России. Российские ученые сделали огромный вклад в получении клинических результатов, необходимых для внедрения ПЛТ в клиническую практику. В докладе отмечается, что протонная лучевая терапия на пути своего развития прошла несколько этапов: экспериментальные исследования и накопление клинических данных, затем, начиная с 1990 г. строительство клинических многокабинных центров ПЛТ, которое после 2011 г. дополнилось разработками однокабинных комплексов. Указано, что накопленные к настоящему времени клинические результаты в ряде случаев показали безальтернативность ПЛТ для лечения ряда онкологических заболеваний, что позволяет говорить о целесообразности разработки специализированных комплексов ПЛТ. Достигнутые в различных клиниках результаты при лечении заболеваний глаза и орбиты, особенно таких, как меланома глаза (резорбция опухоли 98%) привели к тому, что практически все построенные в мире ускорители протонов с энергией достаточной для облучения злокачественных новообразований в области глаза и орбиты (~70 МэВ) были модернизированы и обеспечены лучевым оборудованием для ПЛТ.

В следующем разделе доклада представлены текущие результаты работы по реализации Федеральной научно – технической программы, утвержденной Правительством РФ в марте 2020 года. Программа предусматривает разработку и запуск двух центров протонной лучевой терапии на базе НИЦ «Курчатовский институт» и НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ. В докладе отмечаются концептуальные решения при создании в НИЦ «Курчатовский институт» типового клинического центра на базе специализированного медицинского ускорителя – синхротрона на энергию 250 МэВ, лучевой установки гантри для многопольного облучения и лучевой установки с фиксированным направлением протонного пучка для проведения ПЛТ в положении сидя. Описывается онкофтальмологический комплекс ПЛТ, создаваемый на базе сооруженного в НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ циклотрона Ц – 80.

В заключительном разделе доклада приводятся итоговые результаты и планы графики по разработке и запуску двух центров протонной лучевой терапии на базе НИЦ «Курчатовский институт» и НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ.

1. Адронная терапия: история, статус, перспективы / Кленов Г.И., Хорошков В.С.// Успехи физических наук, 2016, 186, С 891 – 911

Влияние препаратов экзосом нейральных и мезенхимальных стволовых клеток на выживаемость облученных нейральных стволовых клеток мышцы

М.Г. Ратушняк¹, Ю.П. Семочкина¹, Е.В. Ястремский¹, Р.А. Камышинский¹

¹НИИЦ Курчатовский институт, г. Москва

Облучение мозга в процессе лучевой терапии опухолей в области головы и шеи в отдаленный период после облучения часто приводит к развитию осложнений в виде появления когнитивных нарушений у таких пациентов [1]. Одной из причин появления подобных нарушений является вызванная облучением гибель нейральных стволовых клеток (НСК) и последующее нарушение нейрогенеза [2]. Среди возможных способов снижения уровня повреждения НСК стоит выделить терапевтическое использование экзосом стволовых клеток (СК). Экзосомы высвобождаются большинством клеток в течение всей жизни, а экзосомы СК содержат широкий спектр биологически активных веществ (БАВ), способных стимулировать процессы регенерации [3]. Размер, состав и функции экзосом значительно различаются для разных типов клеток [4, 5, 8]. В качестве источника экзосом часто используется кондиционированная среда (КС), в которой культивируют клетки, при этом КС СК разных типов обладает различными спектрами БАВ. Цель данного исследования: выделение и характеристика препаратов экзосом, полученных из КС НСК и мезенхимальных стволовых клеток (МСК) из жировой ткани мышцы и изучение их влияния на выживаемость облученных НСК мышцы *in vitro*.

Экзосомы из КС выделяли двумя методами: с помощью ультрацентрифугирования при 110000g, при +4°C, в течение 2 ч [5, 6] и путем осаждения полиэтиленгликолем (ПЭГ) [7, 8].

Для получения экзосом из КС МСК клетки культивировали в монослое без антибиотиков и без сыворотки в течение 24 ч или в течение 48 ч в той же среде, но с добавлением 2% фетальной бычьей сыворотки (ФБС). ФБС предварительно очищали от экзосом путем ультрацентрифугирования при 110000 g в течение 2 часов при +4°C. НСК культивировали в суспензии в виде нейросфер на низкоадгезивном пластике и в виде монослойной культуры на подложке, сформированной с помощью Geltrex. Средний размер полученных экзосом определяли методом динамического светорассеяния на анализаторе размера частиц и зета потенциала Malvern Zetasizer Nano ZSP. Белок в образцах определяли спектрофотометрически с использованием бичинхониновой кислоты. Характеристику экзосом проводили с помощью проточной цитофлуориметрии с использованием альдегид-сульфатных латексных частиц диаметром 4 мкм и моноклональных антителами к маркерам экзосом CD9, меченных фикоэритрином, и CD63, меченных аллофикоцианином. Микроструктура экзосом, полученных из КС МСК и НСК, и подвергнутых процедуре витрификации, изучена методом криогенной просвечивающей электронной микроскопии (крио-ПЭМ) с помощью установки Titan Krios (Thermo Fisher Scientific, США).

Сразу после гамма - облучения НСК мышцы в дозе 1 Гр клетки высевали в лунки 24-луночных культуральных планшетов, предварительно покрытых раствором Geltrex. Через полчаса после прикрепления клеток в лунки добавляли экзосомы НСК или МСК в концентрации по белку 0,1 и 1 мкг/мл. Исследование влияния экзосом и факторов, секретируемых необлученными НСК, на выживаемость облученных НСК оценивали через 72 часа после воздействия.

Обнаружено, что средний размер частиц, полученных с помощью ультрацентрифугирования КС МСК (культивирование в бессывороточной среде 24 ч) составил 148 нм (80% наблюдаемых частиц), размер частиц, выделенных из КС МСК через 48 ч культивирования в среде с 2% ФБС, составил 114 нм. При использовании осаждения ПЭГ6000 для выделения экзосом из КС МСК были получены частицы со средним размером 117 нм (24 ч инкубации, бессывороточная среда). Частицы экзосом, полученные из КС НСК методом двукратного осаждения ПЭГ6000 имели средний размер 105 нм. Средний диаметр частиц, выделенных из КС НСК (72 ч) с помощью ультрацентрифугирования, составил 70 нм (100%).

Все выделенные препараты экзосом были охарактеризованы с помощью окрашивания антителами к специфическим маркерам экзосом – CD9 и CD63. Экзосомы, полученные как из КС НСК, так и из КС МСК, несут на своей поверхности типичные маркеры экзосом CD9 и CD63. Данные крио-ПЭМ продемонстрировали округлую форму и характерную двойную мембрану экзосом и средний диаметр в диапазоне 30-120 нм. Экзосомы в полученных препаратах незначительно различались по размеру и наличию или отсутствию заполненных частиц.

Через 72 ч после облучения НСК в дозе 1 Гр выживаемость клеток снижалась до 62±2,4% от необлученного контроля. Выживаемость облученных в дозе 1 Гр НСК после инкубации с экзосомами НСК в концентрации 0,1 и 1 мкг/мл по белку достоверно повышалась до 77±1,2% и 78±0,2% соответственно. При добавлении экзосом из МСК выживаемость НСК повышалась до 80±9,5% при добавлении 0,1 мкг/мл экзосом по белку и значимо при добавлении 1 мкг/мл экзосом до 89±6%.

Таким образом, получены и охарактеризованы препараты экзосом из КС НСК и МСК из жировой ткани мышцы. Несмотря на то, что в некоторых случаях размер препаратов экзосом превышал характерные для этого типа везикул размеры, анализ поверхностных маркеров свидетельствует о том, что выделенные везикулы являются экзосомами. При исследовании защитного действия полученных препаратов экзосом из НСК и МСК на облученные НСК обнаружено, что защитный эффект экзосом НСК в концентрации 0,1 и 1 мкг/мл по белку сравним с концентрацией 0,1 мкг/мл экзосом МСК. Наиболее эффективная защита НСК после действия гамма-излучения обнаружена при использовании препаратов экзосом из КС МСК из жировой ткани при их использовании в концентрации 1 мкг/мл по белку.

Работа выполнена при поддержке НИИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1059 от 02.07.2020 г.).

1. Johannesen T.B., Lien H.H., Hole K.H., Lote K. Radiological and clinical assessment of long-term brain tumour survivors after radiotherapy // *Radiother Oncol.* 2003. Т. 69, № 2. С. 169-76.
2. Raber J., Rola R., LeFevour A., Morhardt D., Curley J., Mizumatsu S., VandenBerg S.R., Fike J.R. Radiation-induced cognitive impairments are associated with changes in indicators of hippocampal neurogenesis // *Radiat Res.* 2004. Т. 162, № 1. С. 39-47.
3. Szatanek R., Baj-Krzyworozeka M., Zimoch J., et al. The Methods of Choice for Extracellular Vesicles (EVs) Characterization // *Int J Mol Sci.* 2017. Т. 18. №6.
4. Hu G., Drescher K.M., Chen X.M. Exosomal miRNAs: Biological Properties and Therapeutic Potential // *Front Genet.* 2012. Т. 3. С. 56.
5. Thery C., Amigorena S., Raposo G., Clayton A. Isolation and characterization of exosomes from cell culture supernatants and biological fluids // *Curr Protoc Cell Biol.* 2006. Т. Chapter 3. С. Unit 3 22.
6. Shtam T.A., Samsonov R.A., Volnitskiy A.V. et al. [Isolation of extracellular micro-vesicles from cell culture medium: comparative evaluation of methods] // *Biomed Khim.* 2018. Т. 64. №1. С. 23-30.
7. Weng Y., Sui Z., Shan Y., Hu Y. et al. Effective isolation of exosomes with polyethylene glycol from cell culture supernatant for in-depth proteome profiling // *Analyst.* 2016. Т. 141. №15. С. 4640-4646.
8. Sun X., Jung J.H., Arvola O., Santoso M.R., Giffard R.G., Yang P.C., Stary C.M. Stem Cell-Derived Exosomes Protect Astrocyte Cultures From in vitro Ischemia and Decrease Injury as Post-stroke Intravenous Therapy // *Front Cell Neurosci.* 2019. Vol. 13. С.394.

Экспериментальная верификация радиобиологических моделей действия ускоренных ионов углерода

А.Н. Соловьев¹, В.О. Сабуров¹, М.В. Трошина¹, В.А. Пикалов², В.И. Потетня¹, С.Н. Корякин^{1,3}, И.А. Гулидов¹

¹ МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, Обнинск

² НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино

³ ИАТЭ НИЯУ МИФИ, Обнинск

Ионная лучевая терапия – один из передовых и перспективных методов лечения злокачественных новообразований различных нозологий и локализаций [1]. Радиобиологическое моделирование, в свою очередь, направлено на предсказание ожидаемых показателей контроля опухоли и пределов толерантности здоровых тканей. Адронная лучевая терапия в этом плане стоит особняком, так как требует объединения концепции больших данных, в первую очередь, по терапевтической значимости метода, с богатейшим клиническим опытом, наработанным на традиционных электронных ускорителях и гамма-терапевтических установках. В этой связи представляет особый интерес общая методология постановки радиобиологических экспериментов на пучках, которые впервые вводятся в эксплуатацию.

Для методологической постановки экспериментов на пучке ЦКП «РБС на У-70» (НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, Протвино) использовались программные средства на основе Geant4 (CERN, Швейцария), средства анализа CERN ROOT, а также собственное разработанное программное обеспечение поддержки принятия решений [2]. Физико-дозиметрическое сопровождение проводили с использованием поверенного оборудования производства PTW (Grieburg, Германия). Инженерно-техническое сопровождение проводилось на базе собственных технологических решений, в том числе с использованием аддитивных технологий [3]. Радиобиологическое тестирование проводилось на различных клеточных линиях в условиях *in vitro* в суспензиях и монослоях, а также *in vivo* на перевиваемых опухолях крыс.

Многофакторный анализ данных, наработанных на значительном числе сеансов, начиная с 2014 года [4-6], позволил использовать методы математического моделирования для постановки сессии радиобиологических исследований по прогнозированию ожидаемого уровня выживаемости определённой клеточной культуры с минимизацией числа используемых подгоночных параметров модели. Для минимизации функции ожидаемого уровня выживаемости на протяжённой по глубине мишени использовался алгоритм минимизации L-BFGS-B. Задаваемым критерием оптимизации был параметр наклона кривой, аппроксимирующей число выживших клеток по глубине полиномом первой степени. В качестве основополагающих принципов использовались модифицированные уравнения микродозиметрической кинетической модели (МКМ). Подгоночными параметрами служили чувствительность клеточных культур к гамма-излучению, а также размеры ядра клетки и домена ядра клетки – области микроскопического выделения энергии столь великого, сколь достаточно для деактивации клетки. В качестве модели фрагментации пучка ионов углерода в воде использовался каскад INCLXX. Компоненты пучка ионов в мишени суммировались из предположения независимого действия излучения.

Верификация методами экспериментальной радиобиологии подтвердила оптимизацию целевой функции наклона; разница между предсказанной и измеренной величиной выживаемости по абсолютным значениям находится в пределах 3σ. Таким образом, можно с достаточной уверенностью говорить о подтверждении физико-дозиметрических и эксплуатационных показателей пучка с использованием методологии биологического эксперимента. Это является важным шагом на пути к клиническому применению. Подобные исследования позволяют, в первую очередь, приблизиться к фундаментальному пониманию радиобиологических основ действия ионизирующих излучений, а также обеспечивают методологическую базу верификации пучков терапевтического назначения.

Дальнейшим направлением работ будет экспериментальная верификация моделей в фракционированных режимах облучения, а также изучение сочетанных вариантов лучевой терапии.

1. Соловьев А.Н., Гулидов И.А., Мардынский Ю.С. и соавт. Современные тенденции в мире частиц. Краткие итоги конференции РТСОГ56 // Радиационная биология. Радиозэкология. 2017. Т. 57. № 5. С. 548-550.
2. Соловьев А.Н., Чернуха А.Е., Потетня В.И. Программа поддержки принятия решений по радиобиологическим экспериментам на временном радиобиологическом стенде ускорительного комплекса У-70. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ 2020615172 от 18.05.2020 // Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем. Официальный электронный бюллетень Роспатента. Москва. Роспатент. 2020. Бюл. №5
3. Соловьев А.Н., Чернуха А.Е., Потетня В.И. и соавт. Создание специализированного гребенчатого фильтра для получения равномерной биологической дозы на пучке ионов углерода // Медицинская физика. 2021. Т. 89. № 1. С. 48
4. Антипов Ю.М., Бритвич Г.И., Иванов С.В. и соавт. Формирование поперечно-плоского дозового поля и первые радиобиологические эксперименты на углеродном пучке, выведенном из У-70 // Приборы и техника эксперимента. 2015. № 4. С. 107-116
5. Бекетов Е.Е., Исаева Е.В., Трошина М.В. и соавт. Результаты предварительных исследований биологической эффективности пучка ионов углерода ускорителя У-70 // Радиационная биология. Радиозэкология. 2017. Т. 57. № 5. С. 462-470
6. Корякина Е.В., Потетня В.И., Трошина М.В. и соавт. Сравнение биологической эффективности ускоренных ионов углерода и тяжёлых ядер отдачи на клетках китайского хомячка // Радиация и риск (Бюллетень Национального радиационно-эпидемиологического регистра). 2019. Т. 28. № 3. С. 96-106.

Исследование физико-химических процессов на границе HfO₂/TiN в зависимости от условий отжига и легирования примесями HfO₂

А. В. Бугаев¹, А. С. Конашук¹, Е. О. Филатова¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д.1, Петродворец, Санкт-Петербург, Россия

Благодаря возможности создания сегнетоэлектрических свойств, тонкие плёнки HfO₂ являются основными кандидатами для использования в энергонезависимых запоминающих устройствах и транзисторах с отрицательной ёмкостью. Для получения сегнетоэлектрических свойств необходимо искусственно создать нецентросимметричную орторомбическую фазу (О-фазу) в кристаллической структуре HfO₂ [1], что можно реализовать путем легирования HfO₂ примесями, осаждением электродов (TiN или TaN) на плёнку HfO₂ и высокотемпературным отжигом. Важную роль в образовании орторомбической фазы и результирующих электрофизических свойствах (величина остаточной поляризации и токов утечки, число стабильных циклов переключения) играют процессы на межфазной границе HfO₂/TiN.

Перераспределение азотных и кислородных вакансий между сегнетоэлектриком и электродом является одной из основных причин образования орторомбической фазы [2]. Несмотря на ряд исследований [3,4], до сих пор нет полной ясности в природе этих процессов. Как следует из [5], доля орторомбической фазы напрямую связана с процентом примеси в плёнке и температурой отжига. Поэтому крайне важно знать связь между процессами диффузии азота и кислорода в системе HfO₂/TiN и степенью легирования и условий отжига, что и является целью данной работы. В качестве примесей использовались кремний и алюминий, а образцы отжигались при температурах 850°C и 1000°C. Все измерения проводились в центре синхротронного излучения Petra III, на канале вывода синхротронного излучения P22 методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии высоких энергий.

Было установлено, что температурный отжиг уменьшает содержание TiN_xO_y на границе HfO₂/TiN, возвращая кислород в HfO₂, причём с ростом температуры этот процесс проявляется всё сильнее. Также анализ расстояния между пиками Ti2p_{3/2} и N1s показал, что при увеличении температуры отжига всё больше азота покидает TiN, переходя в нижележащие слои. Установлено, что введение алюминия в оксид гафния приводит к образованию алюмината гафния (HfAl_xO_y), что, по всей видимости, является причиной формирования орторомбической фазы. В образце, легированном кремнием, наблюдается доминирование тетрагональной фазы. Данный вывод подтверждается результатами измерений рентгеновской дифракции.

1. M. Hoffmann, U. Schroeder, T. Schenk et al. "Stabilizing the ferroelectric phase in doped hafnium oxide" *J. Appl. Phys.* 118, 072006 (2015) (doi: 10.1063/1.4927805)
2. L. Baumgarten, T. Szyjka, T. Mittmann, M. Materano, Y. Matveyev, C. Schlueter, T. Mikolajick, U. Schroeder, M. Müller et al. "Impact of vacancies and impurities on PVD- and ALD-grown HfO₂ films" *Appl. Phys. Lett.* 118, 032903 (2021); (doi: 10.1063/5.0035686)
3. Y.-J. Lin, C.-Yu Teng, S.-J. Chang, et. al. "Role of electrode-induced oxygen vacancies in regulating polarization wakeup in ferroelectric capacitors" *Appl. Surf. Sci.* 528, 147014 (2020) (doi: 0.1016/j.apsusc.2020.147014)
4. W. Hamouda, A. Pancotti, C. Lubin et. al. "Physical chemistry of the TiN/Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ interface" *J. Appl. Phys.* 127, 064105 (2020) (doi: 10.1063/1.5128502)
5. M. Hoffmann, U. Schroeder, T. Schenk, T. Shimizu, H. Funakubo, O. Sakata, D. Pohl, M. Drescher, C. Adelman, R. Materlik, A. Kersch, and T. Mikolajick et al. "Stabilizing the ferroelectric phase in doped hafnium oxide" *J. Appl. Phys.* 118, 072006 (2015); (<https://doi.org/10.1063/1.4927805>)

Мемристоры на основе тонких слоёв нанокompозита CoFeB-LiNbO₃ для нейроморфных приложений

А.И. Ильясов^{1,2}, А.В. Емельянов¹, К.Э. Никируй¹, И.А. Суражевский¹,
А.В. Ситников¹, В.В. Рыльков^{1,3}, В.А. Демин¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва

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

³Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, г. Фрязино

Мемристоры – элементы электрической цепи, способные изменять свою проводимость при приложении напряжения и способные сохранять своё резистивное состояние даже после прекращения внешнего воздействия.

Природа этого свойства может быть различной, поскольку известно большое количество мемристивных материалов и механизмов резистивного переключения (РП) в устройствах на их основе [1]. Одним из таких материалов, представляющим большой интерес, являются нанослои LiNbO₃ (LNO) и композита (Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(LiNbO₃)_{100-x} (НК). Уже были продемонстрированы мемристоры на их основе, имеющие до 256 различных состояний проводимости, время удержания состояний (retention time) до 10⁵ с и сохранение этих свойств после 10⁶ циклов РП (endurance) [2]. В устройствах на основе НК мемристивный эффект обусловлен формированием и разрушением проводящих мостиков (филаментов) в изолирующей диэлектрической матрице LNO. Наногранулы металла, формирующие при определённых условиях перколяционные цепочки, на базе которых растут филаменты, уменьшают стохастичность этого процесса, а, следовательно, и разброс характеристик мемристоров от цикла к циклу и от устройства к устройству, а также увеличивает их надёжность.

Существует два основных приложения, в которых мемристоры могут быть наиболее эффективны: аналоговая энергонезависимая резистивная память (RRAM) и эмуляция синапсов в искусственных нейроморфных сетях. Наиболее интересными и многообещающими из последних являются импульсные нейроморфные сети. Их главные преимущества – высокая энергоэффективность, возможность обучения без учителя (unsupervised learning) и природоподобность.

В данной работе изучались мемристоры с тонким слоем LNO у нижнего электрода и следующим за ним чуть более толстым слоем НК. Малая толщина слоёв обеспечивает низкие напряжения РП, что в дальнейшем будет способствовать высокой энергоэффективности систем на основе таких мемристоров. Показано, что они имеют невысокие напряжения переключения (около 2В), что является необходимым условием совместимости с современной микроэлектроникой. Также оценена устойчивость мемристоров к многократным переключениям (по крайней мере, 10⁴ циклов переключения). Показано, что данные характеристики достаточно слабо различаются как от цикла к циклу, так и от устройства к устройству. Наконец, продемонстрирована возможность изменения проводимости мемристоров по биоподобным правилам пластичности, зависящей от времени прихода импульса (Spike-Timing Dependent Plasticity, STDP), в том числе с использованием дофаминоподобной модуляции формы импульсов [3].

После характеристики образцов, была построена простая импульсная нейроморфная сеть 4-в-1 (4 входа, один выход) с мемристивными синапсами и специально разработанным аппаратным аналоговым выходным нейроном, работающим по принципу интегрировать-и-сработать с утечками (Leaky Integrate-and-Fire, LIF) [4]. Исследована возможность обучения такой сети шумовым сигналом различных частот (т.н. Хеббовское обучение). При таком обучении веса синаптических связей (проводимости мемристоров), соответствующих высокочастотным входам, увеличиваются, а низкочастотным – наоборот – уменьшаются. Показано, что эффективность обучения определяется соотношением входных частот, а не выбором конкретных высоко- и низкочастотных входов.

Результаты данной работы могут быть использованы для построения более сложных импульсных нейроморфных сетей и в дальнейших исследованиях в данной области.

Исследования проводились за счёт средств гранта Президента Российской Федерации МК-2203.2021.1.2 (соглашение № 075-15-2021-089).

1. Zhu J., Zhang T., Yang Y. et al. // Physical Review Applied. – 2020. – 7. – 011312. – DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5118217>.
2. Рыльков В. В., Емельянов А. В., Николаев С. Н., и др. // Журнал Экспериментальной И Теоретической Физики. – 2020. – Т. 158, 1 (7). – стр. 164-183 – DOI: 10.31857/S0044451020070159.
3. Nikiruy K. E., Surazhevsky I. A., Demin V. A., and Emelyanov A. V. Spike-Timing-Dependent and Spike-Shape-Independent Plasticities with Dopamine-Like Modulation in Nanocomposite Memristive Synapses // Physica Status Solidi A. – 2020. – 1900938. – DOI: 10.1002/psa.201900938.
4. Demin V.A., Nekhaev D.V., Surazhevsky I.A., et al. // Neural Networks. – 2021. – 134. – P. 64-75. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2020.11.005>.

Влияние плазмонных эффектов на локализацию электромагнитных волн в нитевидных нанокристаллах фосфида галлия

А. Кузнецов¹, С.В. Федина¹, К.П. Котляр³, А.И. Лихачев², Р.Р. Резник^{1,3},
А.Д. Большаков^{1,4,5}

¹СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург

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

³Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

⁴Университет ИТМО, Санкт-Петербург

⁵Московский физико-технический институт, Москва

На текущем этапе технология интегральных оптических схем является одной из наиболее перспективных в области развития информационных технологий, в связи с чем появляются совершенно новые задачи в проведении исследований. С точки зрения как фундаментальных, так и прикладных аспектов в данной области, особый интерес представляют квазиодномерные полупроводниковые наноструктуры на основе соединений A^3B^5 – нитевидные нанокристаллы (ННК).

Главным предметом данной работы являются ННК фосфида галлия (GaP), выращенные с помощью молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Использование данного материала обособно тем, что практически во всем видимом диапазоне GaP обладает крайне малым коэффициентом поглощения [1], тем самым позволяя создавать пассивные оптические элементы (волноводы) с большой свободой в выборе геометрии и размеров. Разработка волноводной наноструктуры достаточно малого размера требует высокой локализации распространяющейся по ней волны. Один из многообещающих методов управления светом на наномасштабах – использование плазмонных эффектов.

Как показывает моделирование [2], локализация поля падающего света в ННК GaP усиливается в присутствии капли галлия. Чтобы подтвердить результаты моделирования экспериментально, был использован метод спектроскопии Рамановского рассеяния с локальным возбуждением. Ввиду того, что интенсивность такого рассеяния пропорциональна квадрату амплитуды электрического поля падающей волны, локализованной в объеме кристалла, то благодаря локальному возбуждению возможно по интенсивности отклика исследовать, как меняется локализация поля в объеме ННК в присутствии плазмонной наночастицы (НЧ). Так, прописывая спектр в каждой точке ННК и регистрируя отклик в виде площади под спектральной кривой можно составить карту распределения интенсивности Рамановского рассеяния вблизи галлиевой капли и у торца ННК без нее.

Для проведения измерений вертикальные ННК GaP длиной около 4 мкм и диаметром около 120 нм с галлиевой каплей с ростовой подложки переносились на стеклянную, принимая горизонтальное положение. Процедура переноса осуществлялась следующим образом: небольшой кусочек кремниевой подложки с выращенным на ней массивом ННК помещался в пробирку с изопропанолом, после чего переносился на 1 минуту в ультразвуковую ванну, где ННК механически отделялись от ростовой подложки. Затем, небольшой объем изопропанола со взвесью ННК наносился на стеклянную подложку, где полностью испарялся.

Для дальнейшего картирования методом Рамановской спектроскопии было необходимо знать точное местоположение каждого ННК. Для этого, на стекло предварительно наносились золотые метки с подслоем оксида индия-олова, видимые в оптический микроскоп. Далее были получены изображения растровой электронной микроскопии (РЭМ) для определения геометрии исследуемых ННК. Полученные изображения позволили установить, во-первых, положение галлиевой капли, а во-вторых, установить, что ННК обладает вертикальными стенками и его сечение слабо меняется по длине ННК.

После процедуры РЭМ подложка с ННК была помещена в установку Рамановской спектроскопии, где было проведено картирование отклика по всей поверхности нескольких наноструктур. Спектральный диапазон был выбран от 300 до 500 см^{-1} т.к. он содержит отклик основных колебательных мод GaP со структурой сфалерита: TO, LO и SO [3]. Сканирование производилось через объектив со стократным увеличением с пространственным шагом 40 нм. Размер лазерного пятна (532 нм) составлял порядка 1 мкм.

По результатам картирования было зафиксировано увеличение интегрального сигнала по мере приближения к интерфейсу с каплей галлия. Чтобы удостовериться в том, что повышение сигнала связано исключительно с локальным усилением электрического поля, а не с образованием, например, вюрцитной фазы, что является распространенным эффектом при росте эпитаксиальных ННК A^3B^5 были детально рассмотрены спектры рассеяния на обоих концах и в середине ННК [4,5]. Данные спектры демонстрируют только пики, характерные для GaP со структурой сфалерита. По мере приближения к капле их максимальная интенсивность растет от 450 до 3000 отн. ед., что напрямую указывает на повышенную локализацию поля вблизи капли, тем самым подтверждая результаты численного моделирования.

В данной работе также была исследована зависимость усиления Рамановского рассеяния в зависимости от поляризации плоско поляризованного лазерного излучения. Для данных измерений ННК были ориентированы вертикально/горизонтально, поляризация была ориентирована параллельно или перпендикулярно ННК. Измерения производились в диапазоне 340-390 см^{-1} . Карты, полученные методом спектроскопии микро-Рамановского рассеяния, показали, что при параллельной поляризации интенсивность сигнала значительно выше.

Кроме усиления Рамановского рассеяния вследствие плазмонных эффектов, было исследовано влияние поляризации на интенсивность фотолуминесценции одиночных ННК GaP с прямозонными вставками GaPAs. В данном случае спектры измерялись при засветке одной из торцевых граней с последующим изменением направления поляризации. Эксперимент также показал значительное увеличение интенсивности при параллельной поляризации.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (проект № 20–72–10192) за поддержку оптической характеристики наноструктур и Министерству науки и высшего образования РФ (грант № FSRM–2020–00011) за поддержку разработки теоретических моделей.

1. Aspnes D. E., Studna A. A. Dielectric functions and optical parameters of si, ge, gap, gaas, gasb, inp, inas, and insb from 1.5 to 6.0 ev // Physical review B. 1983. T. 27. N 2. C. 985.
2. Roy P., Bolshakov A. D. Ga-GaP nanowire hybrid optical system for enhanced coupling, focusing and steering of light // Journal of Physics D: Applied Physics. 2020. T. 53. N 29. C. 295101.
3. Weinstein B. A., Piermarini G. J. Raman scattering and phonon dispersion in Si and GaP at very high pressure // Physical Review B. 1975. T. 12. N 4. C. 1172.
4. Sibirev N. V. et al. Study of Wurtzite Crystal Phase Stabilization in Heterostructured Ga (As, P) Nanowires // Semiconductors. 2020. T. 54. N 14. C. 1862-1865.
5. Fedorov V. V. et al. Self-Catalyzed MBE-Grown GaP Nanowires on Si (111): V/III Ratio Effects on the Morphology and Crystal Phase Switching // Semiconductors. 2018. T. 52. N 16. C. 2092-2095.

Анализ токсичности и антиоксидантных свойств комплексов фуллерена C₆₀ с фолиевой кислотой

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

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова» Национального
исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина
² Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург

Фармпрепараты на основе фуллеренов обладают высоким потенциалом как противоопухолевые агенты. Снижая активность ферментов, катализирующих продукцию активных форм кислорода, улавливая последние и ингибируя перекисное окисление липидов, они могут защищать клетки, подвергшиеся окислительному стрессу и в то же время тормозить рост опухоли [1]. При этом было показано, что фуллерены способны накапливаться в привитых мышам опухолях в 6 раз интенсивнее, чем в нормальных тканях. Перспективным направлением является также создание на их основе радиофармпрепаратов, включающих изотопы с подходящими для воздействия на опухоли ядерно-физическими характеристиками.

Недостатком фуллеренов является их нерастворимость в воде, то есть низкая биосовместимость. Актуальным остается и вопрос адресной доставки такого фармпрепарата в опухоль, и его стабильность в организме. Решением этих проблем может быть получение водорастворимых комплексов фуллеренов с биосовместимыми полимерами, в частности, с поливинилпирролидоном (ПВП) и присоединение к ним фолиевой кислоты, поскольку многие опухолевые клетки обладают большим количеством фолатных рецепторов, чем нормальные. Однако, при функционализации свойства нативного фуллерена могут измениться, поэтому для каждого производного принято определять токсичность и биологическое действие индивидуально.

Целью нашей работы явился анализ токсичности и антиоксидантных свойств комплексов, содержащих фуллерен C₆₀, ПВП и фолиевую кислоту.

Высокоочищенный фуллерен C₆₀ получали способом, описанным в (3). Для получения водорастворимых комплексов фуллеренов с полимером (ПВП) и фолиевой кислотой проводился синтез в растворителе – N,N – диметилформамиде (ДМФА).

Мы проверили токсичность комплексов C₆₀/ПВП и C₆₀/ПВП/ФК методом определения дегидрогеназной активности митохондрий (МТТ-тест). Анализ проводился на следующих линиях клеток: ECV (эндотелиоциты пупочной вены человека), HeLa (карцинома шейки матки человека), A549 (аденокарцинома легкого человека). Эти линии имеют разное число фолатных рецепторов на поверхности. Использовали концентрации комплексов 0,1 мкг/мл, 0,01 мкг/мл, 0,001 мкг/мл. Эксперименты с каждой линией повторяли не менее трех раз. Результаты, полученные в ходе исследования показали, что комплексы во всех концентрациях не токсичны для всех используемых линий клеток. Процент жизнеспособных клеток оставался на том же уровне, что и в контроле. Комплекс фуллерена C₆₀ с поливинилпирролидоном и фолиевой кислотой был помечен FITC и с помощью метода проточной цитометрии показано, что он проникает внутрь клеток HeLa.

Антиоксидантную активность комплекса фуллерена C₆₀ с поливинилпирролидоном и фолиевой кислотой оценивали по ингибированию супероксид радикала O₂^{*-} в реакции аутоокисления адреналина в щелочной среде. Эксперимент проводился не менее трех раз в концентрациях от 2 мг/мл до 2*10⁻⁷ мг/мл с шагом 0,1. Полученные результаты показали, что комплексы обладают наибольшей антиоксидантной активностью в концентрациях 2 мг/мл, 2*10⁻¹ мг/мл и 2*10⁻² мг/мл.

1. Jun-Jie Yin, Fang Lao, Jie Meng, Peter P. Fu, Yuliang Zhao, Gengmei Xing, Xueyun Gao, Baoyun Sun, Paul C. Wang, Chunying Chen and Xing-Jie Liang Inhibition of Tumor Growth by Endohedral Metallofullerenol Nanoparticles Optimized as Reactive Oxygen Species Scavenger Molecular Pharmacology October 2008, 74 (4) 1132-1140; DOI: <https://doi.org/10.1124/mol.108.048348>
2. Bolshakova O., Borisenkova A., Suyasova M., Sedov V., Slobodina A., Timoshenko S., Varfolomeeva E., Golomidov I., Lebedev V., Sarantseva S., Aksenov V. In vitro and in vivo study of the toxicity of fullerenols C₆₀, C₇₀ and C₁₂₀₀ obtained by an original two step method// Mater Sci Eng C. – 2019. V. 104. P. 109945.

Синтез и идентификация комплексов фуллеренов C₆₀ с фолиевой кислотой

И.С. Рябоконт^{1,2}, А.А. Борисенкова^{1,2}, В. П. Седов¹, Д. Н. Орлова¹, М.В. Суясова^{1,3},
В.С. Бурдаков¹, Н.С. Фокин^{1,2}

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

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

³ Санкт-Петербургский университет Государственной противопожарной службы МЧС
России, Санкт-Петербург

Фармпрепараты на основе фуллеренов обладают высоким потенциалом, как противоопухолевые агенты [1]. Однако, исходные фуллерены в воде нерастворимы, т.е. не биосовместимы, что негативно сказывается на возможности целевой доставки. Решением указанной проблемы может стать получение комплексов фуллеренов с биосовместимыми полимерами, а доставку непосредственно к опухолевым клеткам может осуществлять фолиевая кислота, так как фолатных рецепторов у опухолевых клеток больше, чем у нормальных [2].

Целью данной работы являлись синтез и идентификация комплексов фуллеренов C₆₀ с поливинилпирролидоном и фолиевой кислотой.

Высокоочищенный фуллерен C₆₀ получали посредством обогащения исходного экстракта смеси фуллеренов фракционным концентрированием до 96±2 % по фуллерену C₆₀, с последующей хроматографической очисткой раствора полученного концентрата в ароматическом растворителе на активированном угле [3]. Для получения водорастворимых комплексов фуллеренов с полимером (ПВП) и фолиевой кислотой проводился синтез в растворителе – N,N – диметилформамиде (ДМФА).

Наличие характерных химических связей в комплексах фуллеренов с биомедицинскими полимерами и фолиевой кислотой было определено методами УФ и ИК-спектроскопии. Спектры поглощения растворов фуллеренов в ДМФА регистрировались с помощью спектрофотометра СФ-2000. Инфракрасные спектры исследуемых порошковых образцов были получены с использованием ИК Фурье спектрометра ФСМ-1201 (ООО «Мониторинг») в интервале полос пропускания 400-4000 см⁻¹ с применением приставки многократного нарушенного полного внутреннего отражения горизонтального типа МНПВО36.

Для комплекса с ПВП и фолиевой кислотой были получены ИК-спектры, в которых ярко прописывается полоса колебаний С-О связей оксидов фуллеренов 1037 и 1109 см⁻¹. В области 1420 см⁻¹ идет наложение полос С-С в C₆₀ 1428 см⁻¹ и сильной полосы ножничных деформационных колебания С-СН₂ связи в ПВП (1421 см⁻¹). В результате полоса становится широкой и раздваивается. Прописывается 1453 см⁻¹ ее можно отнести к валентным скелетным колебаниям С-С связи ароматического кольца. При образовании комплекса характер полосы в области 1420-1453 см⁻¹ меняется, она становится шире и переходит в тройную. 1512 и 1550 см⁻¹ прописываются две слабые полосы в комплексах валентные колебания С-С ароматического кольца. Эта двойная полоса прописывается у многих соединений фуллеренов. 1652 см⁻¹ - сильные валентные колебания С=О присутствует в ПВП и во всех соединениях фуллерена. Появляется широкая полоса в области 3300-3400 см⁻¹ колебания ОН и NH полиассоциатов.

Размеры частиц полученного комплекса в виде водного раствора были измерены на анализаторе размера и концентрации наночастиц Nanosight LM10. Средний их размер составил 131 нм при концентрации 1,43*10¹⁰ частиц/мл.

1. Prylutska S., Burlaka A.P. Using water-soluble C₆₀ fullerenes in anticancer therapy // Cancer Nanotechnol. – 2011. – V. 2. – P. 105–107.

2. Garcia-Bennett A., Nees M., Fadeel B. In search of the Holy Grail: folate-targeted nanoparticles for cancer therapy // Biochemical pharmacology. – 2011. – V. 81. – №. 8. – P. 976–984.

3. Патент № 2456233 Российская Федерация, МПК C01B31/02 (2010.08), B01D11/02 (2010.08). Способ получения фуллерена C₆₀: № 20: заяв. 13.08.2010. опубли. 20.07.2012 /Грушко Ю.С., Седов В.П., Колесник С.Г.

Строение и физико-химические свойства водорастворимых производных эндодральных металлофуллеренов

Суюсова М.В.^{1,2}, Фокин Н.С.^{1,3}, Титова А.В.^{1,3}, Седов В.П.¹, Орлова Д.Н.¹,
Иванов А.В.², Лютлова Ж.Б.^{1,3}, Борисенкова А.А.^{1,3}

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

²Санкт-Петербургский университет Государственной противопожарной службы МЧС России, Санкт-Петербург

³Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург

К настоящему моменту направление фуллеренов и их производных достигло очередного витка развития за счет многочисленных теоретических и экспериментальных исследований эндодральных комплексов фуллеренов, функционально замещенных фуллеренов и гетерофуллеренов для квантовых компьютеров [1,2], нанoeлектронных приборов [3,4], медицины и биологии [5-7]. Накопление большого числа данных, требующих вдумчивого анализа и качественно-нового подхода к пониманию физических и химических процессов, происходящих в фуллереновых системах, привело к значительному росту интереса исследователей и способствовало открытию новых и неожиданных свойств фуллереновых производных.

В данной работе описан новый продуктивный способ получения водорастворимых производных эндофуллеренов лантаноидов (от празеодима до тулия, атомные номера $Z=59-69$) в виде полигидроксилированных фуллеренов и комплексов с поливинилпирролидоном. Для синтеза указанных образцов были использованы прекурсоры вида $\text{Ln}@C_{2n}$, полученные экстракцией фуллеренсодержащей сажи диметилформамидом с добавлением нескольких десятых объемных процентов гигразин-гидрата. Проведено комплексное исследование строения, физико-химических свойств указанных объектов, особенностей растворимости и агрегации в водных средах, которое позволило приблизиться к пониманию природы структурирования растворов, а также оценить влияние на неё ряда факторов (концентрации, температуры, pH).

1. S. Hasegawa, Y. Hashikawa, T. Kato and Y. Murata, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2018, 57, 12804–12808.
2. S. Schaefer, K. Huebener, W. Harneit, C. Boehme, K. Fostiropoulos, H. Angermann, J. Rappich, J. Behrends and K. Lips. *Solid State Sci.*, 2008, 10, 1314–1321.
3. X. Zhong, R. Pandey, A. R. Rocha and S. P. Karna, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2010, 1, 1584–1589.
4. S. B. Novir and M. R. Aram, *J. Mol. Modeling*, 2020, 26, 1–18.
5. E. Castro, A. H. Garcia, G. Zavala and L. Echevoyen, *J. Mater. Chem. B*, 2017, 5, 6523–6535.
6. A. Grebinyk, S. Prylutska, A. Buchelnikov, N. Tverdokhle, S. Grebinyk, M. Evstigneev, O. Matyshevska, V. Cherepanov, Y. Prylutsky, V. Yashchuk, A. Naumovets, U. Ritter, T. Dandekar and M. Frohme, *Pharmaceutics*, 2019, 11, 1-23.
7. L. B. Sukhodub, L. F. Sukhodub, M. O. Kumeda, S. V. Prylutska, V. Deineka, Y. I. Prylutsky and U. Ritter, *Carbohydrate polymers*, 2019, 223, 1–8.

Исследование процессов осаждения, структуры и свойств покрытий Zr-B-N при использовании методов DCMS и HIPIMS

А.Д. Сытченко, Ф.В. Кирюханцев-Корнеев

НИТУ «МИСиС», г. Москва

Настоящая работа посвящена получению покрытий в системе Zr-B-N методом высокоомощного импульсного магнетронного распыления (HIPIMS) при варьировании парциального давления газов Ar и N₂, исследованию их структуры, оптических характеристик, механических и трибологических свойств, стойкости к ударно-динамическим воздействиям, а также сравнительной диагностике плазмы в процессе напыления покрытий методами магнетронного распыления постоянного тока (DCMS) и HIPIMS.

Покрытия были получены методами DCMS и HIPIMS с применением СВС-мишени ZrB₂ в среде Ar (99,9995%), N₂ (99,999%) и газовой смеси Ar+15%N₂. Метод DCMS осуществлялся с использованием источника питания Pinnacle Plus 5x5 при следующих электрических параметрах: сила тока 2 А, напряжение составляли 500 В. Процесс HIPIMS проводили при следующих параметрах: средняя мощность 1 кВт, пиковая мощность 70 кВт, пиковая сила тока 130 А, частота 100 Гц, длительность импульса 200 мкс. Рабочее давление в вакуумной камере составляло 0,1–0,2 Па. Покрытия осаждались в течение 15–40 минут. В качестве модельных подложек использовались стекло, Si (100) типа КЭФ-4.5 и сталь Р18. Подложки перед нанесением покрытия подвергались очистке в изопропиловом спирте на установке УЗДН-2Т с рабочей частотой 22 кГц в течение 3 мин. Непосредственно перед нанесением покрытий в вакуумной камере в течение 10 мин проводилось травление подложек ионами Ar⁺. Для диагностики плазмы использовался оптический спектрометр PlasmaScore Horiba JY. Для расшифровки спектров применялась база данных программы PlasmaScore. Структурные исследования покрытий проводились методами сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионной спектроскопии и рентгенофазового анализа. Коэффициент пропускания покрытий определяли с помощью спектрофотометра КФК-3 в диапазоне длин волн 350–950 нм. Механические свойства покрытий определялись методом наноиндентирования при нагрузке 4 Н. Трибологические характеристики исследовались в режиме трения-скольжения при нагрузке 1 Н. Стойкость к циклическому ударно-динамическому воздействию определялась при 100 и 300 Н. После испытаний покрытия исследовались методом оптической профилометрии.

Анализ спектров плазмы, снятых в процессе DCMS, показал, что при осаждении в Ar, самые интенсивные пики соответствовали аргону, что связано с преимущественной ионизацией газа при DCMS. При введении 15%N₂ выявлялись дополнительные пики N. Переход к реактивному распылению в 100%N₂ привел к кардинальному изменению спектров плазмы: наблюдались высокоинтенсивные пики N, что говорит о высокой степени ионизации азота. Концентрации бора и циркония в плазме постепенно снижались при увеличении концентрации азота. В случае диагностики плазмы при HIPIMS самая интенсивная линия на спектрограммах соответствовала цирконию. Общая интенсивность линий Ar была на ~70% ниже по сравнению с DCMS. С введением 15%N₂ наблюдалось незначительное снижение концентрации Zr; пиков, соответствующих N, выявлено не было. При переходе к распылению в 100% N₂ концентрация элементов мишени в плазме резко снизилась в 4 и 6 раз, а концентрация азота увеличилась на 35%.

Состав плазмы и степень ионизации металлических и неметаллических элементов напрямую влияет на состав и скорость роста покрытий. С введением азота в рабочую атмосферу наблюдалось закономерное снижение концентрации Zr и В и увеличение содержания N, что хорошо коррелирует с результатами спектроскопии плазмы при DCMS и HIPIMS. При сравнении толщин и скоростей роста покрытий, полученных методами DCMS и HIPIMS было выявлено, что образцы, осажденные в Ar, характеризовались максимальной толщиной и скоростью роста, что может быть связано с высоким содержанием металлических (Zr) и неметаллических (В, Аг) ионов в плазме. Введение N₂ приводило к снижению концентрации Zr, В и Аг в плазме и падению скорости роста в 2–15 раз, что вероятно связано с уменьшением концентрации ионов Zr и В в плазме и отравлением мишени при распылении в азоте [1].

Отметим, что при использовании как метода DCMS, так и HIPIMS с введением азота наблюдалось закономерное снижение концентрации Zr и В, что приводило к снижению скорости роста покрытий. Однако при использовании данных методов осаждения были выявлены существенные различия в составе плазмы. При DCMS плазма состояла в основном из ионов газообразных элементов (Ar, В, N). Тогда как при использовании метода HIPIMS металлические элементы (Zr) имели максимальную интенсивность. Отметим, что при переходе от DCMS к HIPIMS эмиссия частиц Zr и Аг значительно увеличивается, что указывает на высокую ионизацию частиц металла и газа [2]. Уменьшение скорости роста при переходе от DCMS к HIPIMS может быть связано с эффектом самораспыления, а также с уменьшением общего времени распыления [3].

Детальное исследование покрытий Zr-B-N, полученных методом HIPIMS, показало, что образцы обладали плотной структурой без выраженных столбчатых элементов. Введение азота способствовало снижению размера зерна фазы h-ZrB₂ и аморфизации покрытий. Методами спектроскопии комбинационного рассеяния света и инфракрасной спектроскопии установлено, что при осаждении в азотсодержащей среде образовалась фаза BN. Образцы, полученные в среде Ar и 15%N₂, имели плотное покрытие серого цвета и не обладали оптической прозрачностью. Повышение концентрации азота до 100% привело к образованию оптически прозрачного покрытия с коэффициентом оптического пропускания 97%. Твердость покрытия, полученного в Ar, составила 19 ГПа, а модуль упругости 221 ГПа. С введением азота эти характеристики снижались на 47% и 37%, соответственно. При осаждении в среде N₂ наблюдалось снижение начального коэффициента трения на ~60%. Ударно-динамические испытания показали рост износостойкости на 50% при введении азота в состав покрытий. При сравнении образцов DCMS и HIPIMS было выявлено, что использование метода HIPIMS увеличивает адгезионную прочность, что положительно влияет на трибологические характеристики и жаростойкость покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект 19-08-00187).

1. Kubart T., Fernandes D. F., Nyberg T. On the description of metal ion return in reactive high power impulse magnetron sputtering. Surf. Coat. Technol. 2021, V. 418, № 127234.
2. Sarakinos K., Alami J., Klever C., Wuttig M. Growth of TiOx films by high power pulsed magnetron sputtering from a compound TiO_{1.8} target. Reviews on Advanced Materials Science 2007, V. 15(1), P. 44–48.
3. Alami J., Sarakinos K., Mark G., Wuttig M. On the deposition rate in a high power pulsed magnetron sputtering discharge. Applied Physics Letters 2006, V. 89(15), № 154104.

Структура и свойства комплексов эндофуллеренов с поливинилпирролидоном по данным ИК, УФ-Вид спектроскопии и атомно-силовой микроскопии

***А.В.Титова^{1,3}, М.В. Суясова^{1,2}, В.П. Седов¹, Д.Н. Орлова¹, А.В. Иванов²,
А.А. Борисенкова^{1,3}, Ж.Б. Лютова^{1,3}, В.С. Бурдаков¹, А.В. Шабунина^{1,3}***

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

²*Санкт-Петербургский университет Государственной противопожарной службы МЧС России, Санкт-Петербург*

³*Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург*

Фуллерен – аллотропная форма углерода, представляющая выпуклый многогранник, состоящий из 60 и более атомов. Фуллерен знаменит благодаря своим уникальным свойствам и может быть использован как в медицине, так и в химической и фармацевтической промышленности [1]. Производные фуллерена могут выступать в качестве потенциальных агентов для борьбы со СПИДом [2], известно их использование для фотодинамической терапии рака [3]. В последнее время все большее применение находят эндофуллерены (фуллерены с атомами других химических элементов внутри углеродного каркаса). Они могут быть использованы при разработке эффективных контрастных материалов для томографических методов диагностики (магнитно-резонансных, рентгеновских), а также при получении радиоактивных меток и радиофармпрепаратов (радиоактивных изотопов) путём активации ядер тяжёлых атомов внутри фуллереновых каркасов, облучённых нейтронами или протонами [4]. Следует отметить, что чистые фуллерены не могут быть использованы в медицине из-за того, что они не растворимы в воде, имеют низкую биосовместимость и склонны к образованию агрегатов. Поэтому для эффективного использования в медицинских целях пригодны только водорастворимые производные фуллерена, которые получают посредством функционализации группами -NH₂, -OH, -COOH, а также образованием комплексов фуллеренов с полимерами [5].

В НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ разработан метод получения водорастворимых эндометаллофуллеренов [6]. При этом, в начале получают фуллерен-содержащую сажу испарением лантаноид-содержащего графитового электрода, пустотелые фуллерены из сажи удаляют экстракцией слабополярным ароматическим растворителем о-ксилолом, а эндометаллофуллерены экстрагируют сильнополярным растворителем – диметилформамидом с добавкой 0.1-0.2 %об. гидразин гидрата. Полученный раствор эндометаллофуллеренов смешивают с раствором поливинилпирролидона. В результате донорно-акцепторного взаимодействия молекулы фуллерена встраиваются в цепь поливинилпирролидона образуются водорастворимые комплексы.

Целью данной работы являлось исследование структуры и свойств водорастворимых комплексов эндометаллофуллеренов: Dy, Eu, Gd, Ho, Sm, Tb с поливинилпирролидоном.

К конкретным задачам мы отнесли оценку возможности анализа полученных соединений методами ИК и УФ-Вид спектроскопии, определение размера и концентрации наночастиц в растворе, а также исследование их структурных особенностей при помощи метода атомно-силовой микроскопии.

Для всех исследуемых комплексов были получены ИК-спектры, в которых наблюдаются полосы поглощения при 1290; 1430; 1669 и 2900 см⁻¹, характерные для скелетных колебаний молекул поливинилпирролидона, при этом смещение полос поглощения относительно исходного полимера не наблюдалось.

В полученных спектрах оптического поглощения для всех образцов наблюдается максимум поглощения при 240 нм, что может быть связано с наличием π-π* электронных переходов поливинилпирролидона.

Размер частиц по данным атомно-силовой микроскопии, а также по данным, полученным на анализаторе размера и концентрации наночастиц Nanosight LM10, колеблется от 81 до 114 нм, при концентрации от 4.34·10¹³ до 5.9·10¹³ частиц/мл, причем при концентрации 4.48·10¹³ и 4.34·10¹³ частиц/мл наблюдаются агрегаты размером 105 и 114 нм, в то время как частицы с размером 81 нм наблюдаются при концентрациях от 5.68·10¹³ до 6.72·10¹³ частиц/мл, что может быть связано с исчезновением энергетического барьера между частицами при достижении критической концентрации и следующей за этим коагуляцией.

Полученные данные могут быть использованы в последующих биомедицинских исследованиях комплексов водорастворимых эндометаллофуллеренов с полимерами.

1. Пат. 2630561 РФ, МПК C01B 32/156, B82B 3/00, B82Y 40/00. Способ получения водно-солевых дисперсий фуллерена / Пургина Д. Д., Андреев С. М., Шершакова Н. Н., Барабошкина Е. Н., Хаитов М. Р.; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение "Государственный научный центр "Институт иммунологии" Федерального медико-биологического агентства России. - № 215145015; заявл. 20.10.2015; опубл.11.09.2017, Бюл. № 12;

2. Фуллерены: биомедицинский аспект / Андреев С. М., Башкатова Е. Н., Пургина Д. Д // иммунология. – 2015. - № 1. – С. 57-61;

3. Functionalized fullerenes mediate photodynamic killing of cancer cells: Type I versus Type II photochemical mechanism / Mroz P., Pawlak A., Satti M // Free Radical Biology & Medicine. – 2007. - № 43. – С. 711-719;

4. Полимерные комплексы эндофуллерена Fe@c60 биомедицинского назначения / Евлампиева Н. П., Лебедев В. Т., Сжогина А.А.[и др.]. // Вестник СПбГУ. Физика и химия. - 2018. - Т. 5 (63). - Вып. 2.-С.86-96;

5. Седов В. П. Методы синтеза и идентификации гидроксильрованных производных фуллеренов – фуллеренолов : учеб.-метод. пособие / В. П. Седов.- Гатчина. : НИЦ «Курчатовский институт», 2014. – 42 с;

6. Пат. 2659972 РФ, МПК C01B 32/156, B82B 3/00, B82Y 40/00. Способ получения водорастворимых гидроксильрованных производных эндометаллофуллеренов лантаноидов / Седов В. П., Сжогина А. А., Суясова М. В., Шилин В. А. Лебедев В. Т.; заявитель и патентообладатель ФГБУ "ПИЯФ" – № 2016151106; заявл. 23.12.2016; опубл. 04.07.2018, Бюл. № 19.

Влияние барьерных слоёв на химический состав и отражательные характеристики многослойных зеркал Cr/Be

Е.С. Фатеева, С.С. Сахоненков, Е.О. Филатова

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Многослойные наносистемы являются одними из ключевых элементов в рентгенооптике благодаря доступности технологий их производства и возможности получения высоких отражательных характеристик зеркал. Основными кандидатами для области коротковолнового излучения (3 – 6 нм) являются многослойные рентгеновские зеркала (МРЗ) на основе Cr. Такие зеркала перспективны для применения в приборах элементного анализа материалов, а также могут использоваться для решения различных задач современной физики и техники, таких как создание микроскопов в спектральных областях “окон прозрачности” воды и углерода ($\lambda = 2\text{--}5$ нм), что открывает широкий спектр возможностей для изучения углеродосодержащих веществ и биологических структур.

Существенное влияние на величину отражательной способности МРЗ оказывают промежуточные слои, формирующиеся на межфазной границе в результате многих факторов, таких как взаимодиффузия материалов, механическое проникновение падающих атомов в процессе напыления зеркал, химические реакции, минимизация поверхностной энергии и т.д. Присутствие таких слоёв в многослойной структуре значительно снижает ее теоретически ожидаемые рентгенооптические параметры.

В настоящей работе рассматривались многослойные рентгеновские зеркала на основе пары материалов Cr/Be с ультратонкими слоями. В ходе работы были изучены особенности строения протяженных переходных зон, а также возможности влияния на них путем введения барьерных слоёв C и V_4C . Кроме того, было изучено влияние барьерных слоев на отражательные характеристики зеркал.

Исследования химического состава МРЗ проводились с использованием метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Измерения проводились на лабораторном модуле ЭСХА Курчатовского института, где в качестве возбуждающего излучения использовался монохроматический пучок фотонов с энергией 1486.6 эВ (фотоэмиссионная линия Al K_{α}). Измерения отражательной способности многослойных структур проводились методом рефлектометрии рентгеновских лучей в центре синхротронного излучения BESSY.

В результате проведенного исследования было установлено:

(i) В наноразмерных многослойных структурах происходит полное перемешивание слоёв хрома и бериллия с образованием бериллидов CrBe_2 и CrBe_{12} ;

(ii) Введение барьерного слоя (C, V_4C) приводит к подавлению содержания бериллида CrBe_2 с одновременным увеличением содержания CrBe_{12} , независимо от порядка нанесения барьерного слоя (на Cr или на Be). Кроме того, образуются карбиды хрома и бериллия и борид хрома (в случае прослойки V_4C);

(iii) Лучшую отражательную способность демонстрирует многослойное рентгеновское зеркало $[\text{C}/\text{Cr}/\text{Be}]_{\times 180}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-72-20125.

1. Svechnikov, M. V., Chkhalo, N. I., Gusev, S. A., Nechay, A. N., Pariev, D. E., Pestov, A. E., Polkovnikov, V. N., Tatarskiy, D. A., Salashchenko, N. N., Schäfers, F., Sertsu, M. G., Sokolov, A., Vainer, Y. A., Zorina, M. V., Influence of Barrier Interlayers on the Performance of Mo/Be Multilayer Mirrors for next-Generation EUV Lithography // Opt. Express 2018, doi.org/10.1364/oe.26.033718
2. S.S. Sakhonenkov, E.O. Filatova, S.A. Kasatkov, E.S. Fateeva, R.S. Pleshkov, and V.N. Polkovnikov, Layer intermixing in ultrathin Cr/Be layered system and impact of barrier layers on interface region // Applied Surface Science 2021, https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.151114.

Димеры плазмонных наночастиц, получаемые с помощью молекулярной сшивки диаминотоланом

А.И. Шевчук, А.Н. Смирнов, В.О. Свинко, Е.В. Соловьева

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Создание и исследования новых плазмонных наноматериалов с высокой оптической активностью в видимом диапазоне электромагнитного спектра является актуальным направлением в области оптической спектроскопии и нанофотоники. Перспективными являются системы с димерами и более крупными агрегатами наночастиц (НЧ), так как они обладают более высокой оптической активностью, нежели системы с разобщенными НЧ [1]. Получение подобных прекурсоров материалов важно для создания современных оптических датчиков, которые в дальнейшем позволят проводить идентификацию соединений с пределом обнаружения вплоть до единичных молекул. В рамках систематического подхода по исследованию модификаторов металлической поверхности, обладающих свойствами линкеров, нами исследовались четыре класса соединений, одно из которых толаны. Толаны – хорошо известные структурообразующие единицы в области металл-органических каркасов (англ. metal-organic framework, MOF) [2], в данной работе рассмотрена возможность их использования для управляемой самоорганизации НЧ серебра.

Для модификации поверхности серебряных НЧ был использован 4,4'-диаминотолан (ДАТ) – производное с двумя аминогруппами на противоположных концах молекулы. Полученные системы изучались с помощью спектроскопии Гигантского комбинационного рассеяния (ГКР), спектроскопии поглощения в УФ и видимой области и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

ПЭМ исследование морфологии, размера и дисперсности серебряных НЧ, модифицированных ДАТ, позволило определить присутствие продолговатых димеров и тримеров НЧ, образующихся, вероятно, за счет связывания посредством органического лиганда. Процентное содержание агрегатов по отношению к единичным НЧ имеет прямую зависимость от концентрации ДАТ в исходном растворе, но только в диапазоне содержаний 10^{-7} – 2.5×10^{-6} моль/л. При более высокой концентрации модификатора наблюдалось значительное снижение количества димеров НЧ, наблюдаемых на снимках ПЭМ. Спектры поглощения, зарегистрированные для серебряного золя при различном содержании ДАТ, находятся в согласии с результатами ПЭМ, и показывают длинноволновый сдвиг полосы плазмонного резонанса при формировании агрегатов НЧ. Спектры ГКР полученных систем также показали немонотонный характер концентрационной зависимости с достижением максимума в диапазоне концентраций 2.5 – 5×10^{-6} моль/л.

Совокупный анализ полученных данных говорит о том, что эффективность сшивки НЧ серебра диаминотоланом определяется степенью покрытия поверхности и реализуется преимущественно при покрытиях, не превышающих один монослой.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 20-33-70034). Авторы выражают благодарность Научному Парку СПбГУ: междисциплинарному РЦ «Нанотехнологии», РЦ «Оптические и лазерные методы исследования вещества», РЦ «Методы анализа состава вещества», РЦ «Физические методы исследования поверхности».

1. Schlücker, S. Surface-Enhanced Raman Spectroscopy: Concepts and Chemical Applications // *Angewandte Chemie International Edition*, 2014. Т. 53. С. 4756–4795.
2. Fasina, T. M., Collings, J. C., Burke, J. M., Batsanov, A. S., Ward, R. M., Albesa-Jové, D., ... Marder, T. B. Synthesis, optical properties, crystal structures and phase behaviour of symmetric, conjugated ethynylarene-based rigid rods with terminal carboxylate groups // *J. Mater. Chem.*, 2005. Т. 15. С. 690–697.

Низкотемпературные тепловые, магнитные и электрические свойства нанокompозита свинец-пористое стекло в магнитном поле

А.Е. Шитов, Н.Ю. Михайлин, Ю.А. Кумзоров, Д. В. Шамшур

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 9402, Санкт-Петербург

В работе были изучены магнитные и тепловые свойства нанокompозита свинец-пористое стекло (Pb-ПС) в сверхпроводящем (СП) состоянии. В пористом стекле поры образуют случайную многосвязную сеть с малыми вариациями характерного размера элементов $\Delta d \sim 5\%$, объем пор составляет $\approx 25\%$ материала. Изменение условий изготовления и начального состава стекла позволяют получать структуры с различными характерными размерами пор d . Свинец в нанокompозите образует трехмерную многосвязную систему нитей, характерный размер которых определяется размером пор. В такой структуре характерные размеры частиц сверхпроводника меньше, чем параметры СП состояния в массивном сверхпроводящем свинце: длина когерентности $\xi = 830$ нм и глубина проникновения магнитного поля $\lambda(T = 0 \text{ K}) = 370$ нм, что приводит к количественным и качественным изменениям сверхпроводящих свойств нанокompозита по сравнению с массивным материалом. Так, критическая температура СП перехода $T_c \approx 4.2$ К в индии, наноструктурированном в матрице опала с минимальным диаметром токопроводящей сетки $d = 10$ нм, увеличивается на $\sim 30\%$ по сравнению с объемным индием $T_{c \text{ volume}} = 3.41$ К, а величина критического магнитного поля H_c достигает $H_c(T = 0 \text{ K}) \approx 20$ кЭ по сравнению с $H_{c \text{ volume}}(0) = 280$ Э [1]. Еще более значительное увеличение $H_c(0) \approx 150$ кЭ обнаружено нами ранее в Pb-ПС с характерным размером пор $d = 3$ нм (для массивного свинца $H_{c \text{ volume}}(0) = 803$ Э) [2]. Высокие значения H_c , наблюдаемые в нанокompозитах, характерны для сверхпроводников 2 рода, что также проявляется в их магнитных свойствах. На магнитопольных зависимостях магнитного момента $m(H)$ нанокompозита Pb-ПС с $d = 7$ нм при температурах $T < T_c \approx 7.2$ К наблюдается гистерезис, характерный для сверхпроводников 2 рода с сильным пиннингом. При температурах $T < 5$ К могут возникать квазипериодические скачки магнитного потока вплоть до $m(H) \sim 0$ [2, 3] с последующим восстановлением СП состояния материала, связанные с лавинообразным проникновением магнитного поля в образец при достижении критического тока в контуре токопроводящей сетки Pb. Подобные магнитные свойства также характерны и для других трехмерных СП наноструктур, например, In-опал [4].

Так как лавинообразный процесс проникновения поля в структуру приводит к переходу из СП состояния в нормальное [4, 5], такой фазовый переход может проявляться и на зависимости теплоемкости от магнитного поля. Для проверки этого предположения нами были изучены температурные и магнитопольные зависимости теплоемкости $C(T, H)$ и магнитного момента $m(T, H)$ а также тепловые эффекты $Q(T, H)$ в СП нанокompозите свинец-пористое стекло с диаметром пор $d = 7$ нм. Образцы Pb-ПС создавались путем заполнения пористого стекла свинцом из расплава под давлением, при этом заполнение пор матрицы СП материалом составляет более 95%. Измерения магнитного момента и теплоемкости проводились на установке QD PPMS-14 с помощью вибрационного магнитометра и специальной вставки измерения теплоемкости в диапазоне температур $2 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$ и в магнитных полях до 140 кЭ.

На зависимостях теплоемкости нанокompозита Pb-ПС от температуры $C(T)$ был зафиксирован СП переход при $T = T_c \approx 7.2$ К, при увеличении внешнего магнитного поля СП переход смещался в сторону меньших температур. Так, например, во внешнем магнитном поле 1 кЭ температура СП перехода составила $T(H = 1 \text{ кЭ}) = 6.9 \text{ K} < T_c(H = 0)$, что согласуется с полученными ранее зависимостями $H_c(T)$ [2].

На магнитопольных зависимостях теплоемкости $C(H)$ при температуре $T = 6.5 \text{ K} < T_c$ наблюдается максимум в полях, близких к H_c , связанный с переходом системы в нормальное состояние. При более низкой температуре $T = 5 \text{ K}$ на зависимости $C(H)$ в области СП состояния нанокompозита наблюдаются квазипериодические скачки вплоть до H_{c2} . В то же время на зависимостях $m(H)$ при $T = 6.5 \text{ K}$ наблюдается гистерезис без скачков магнитного потока, а при $T = 5 \text{ K}$ – гистерезис со скачками потока. Таким образом, скачки $C(H)$ и $m(H)$ наблюдались в одной области магнитных полей и температур, при этом скачков $C(H)$ было заметно больше, чем $m(H)$. Для проверки того, что диэлектрическая матрица ПС не вносит особенностей в полученные зависимости, была снята магнитопольная зависимость измеряемой теплоемкости $C(H)$ пустого ПС. Установлено, что теплоемкость ПС не зависит от магнитного поля во всем измеряемом диапазоне, в то время как для нанокompозита Pb-ПС измеряемая теплоемкость меняется скачкообразно, а при достижении критического магнитного поля $H_{c2}(5 \text{ K}) > 20$ кЭ перестает зависеть от магнитного поля.

Можно предположить, что скачкообразная зависимость $C(H)$ вызвана тем, что в процессе измерения теплоемкости малый измерительный нагрев инициирует возникновение термомагнитной неустойчивости и лавинообразное проникновение магнитного потока в Pb-ПС, что приводит к дополнительному выделению тепла в образце. Были проведены измерения магнитопольной зависимости температуры $T(H)$ и магнитного момента $m(H)$. Результаты подтвердили полученные ранее экспериментальные данные, скачки магнитного потока и температуры наблюдаются в одной и той же области T и H , однако моментов выделения тепла больше.

Таким образом, нами были исследованы магнитопольные зависимости теплоемкости $C(H)$, магнитного момента $m(H)$ и температуры $T(H)$ нанокompозита Pb-ПС с характерным размером пор 7 нм. При изучении низкотемпературных зависимостей $C(T, H)$ нанокompозита Pb-ПС в магнитных полях $H < H_c(T)$ обнаружено, что измерительные импульсы тепла могут инициировать скачки магнитного потока, сопровождающиеся выделением тепла в нанокompозите. Мы полагаем, что измерительные импульсы ΔT инициируют возникновение термомагнитной неустойчивости и лавинообразное проникновение магнитного потока в Pb-ПС. Обнаружено, что в зависимости $m(H)$ наблюдаются квазипериодические скачки магнитного потока, которые сопровождаются скачками на зависимости $T(H)$, соответствующими выделению тепла в образце. Скачки магнитного потока и выделение тепла в образце наблюдаются в одной и той же области температур и магнитных полей, но моментов выделения тепла больше, чем скачков магнитного момента, что может быть связано с выделением тепла при перераспределении экранирующих токов в структуре без проникновения магнитного поля в объем структуры.

1. Шамшур Д.В. и др., Физика твердого тела, т. 47 в. 11 стр. 1927 (2005).
2. Шамшур Д.В. и др., Физика твердого тела, т.60, в.6, стр. 1058 (2018).
3. Tien C., and etc.// Phys. Rev. B, 83, 014502 (2011).
4. Михайлин Н.Ю. и др., ЖЭТФ, т. 155, в. 4, стр. 1–7 (2019).
5. P. S. Swartz and C. P. Bean, Journal of Applied Physics, 39, 4991 (1968).