



**XVII Курчатовская
МОЛОДЕЖНАЯ НАУЧНАЯ ШКОЛА**

**СБОРНИК
АННОТАЦИЙ**



Оглавление:

Секция 1. НБИКС-природоподобные технологии.....	2
Секция 2. Исследовательская инфраструктура мегасайенс: синхротронные и нейтронные источники	64
Секция 3. Новые материалы и технологии.....	112
Секция 4. Информационные технологии и системы	189
Секция 5. Ядерная медицина	214
Секция 6. Генетические технологи	237
Секция 7. Физика ядра и элементарных частиц, астрофизика	303
Секция 8. Перспективные энергетические технологии..	341

Секция 1.
НБИКС-природоподобные технологии

ФОТОБИОТОПЛИВНЫЙ ЭЛЕМЕНТ НА ОСНОВЕ ЦИАНОБАКТЕРИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОВОДЯЩЕГО ГИДРОГЕЛЯ С PEDOT:PSS С ДОБАВЛЕНИЕМ НАНОТРУБОК

М.С. Аксёнова^{1,2}, П.М. Готовцев^{1,2}

¹ НИЦ Курчатовский Институт, aksenova.ms@phystech.ru

² Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)

Использование фотосинтезирующих бактерий - перспективное направление развития зеленой энергетики. Среди множества из применением интересным является использование клеток в качестве фоточувствительного компонента в фотобиотопливных элементах. [1] До сих пор мощность фотобиотопливных элементов остается низкой, поэтому в данной работе мы рассматриваем новые материалы электродов для повышения эффективности ячейки.

В ходе работы была собрана двухкамерная ячейка. Анодная камера: открытая емкость с прямым доступом к воздуху и свету. Анод: гидрогель на основе проводящего полимера PEDOT:PSS с добавлением нанотрубок 2мас.%, приготовленный по методике [2] с биопленкой цианобактерий *Arthrospira platensis*. Анодная и катодная камера разделялись протонопроводящей мембраной Nafion 115. Катодная камера: емкость с водой с открытым доступом к воздуху. Катод: никелевая пластинка.

Был зафиксирован ток порядка 1мкА и снята вольтамперная характеристика ячейки на свету и в темноте (см. рис.1) Сравнительный анализ полученных результатов показывает, что ток увеличивается при освещении бактерий и уменьшается, когда они находятся без света. Таким образом, с новыми

электродами удалось получить электрический ток, который обусловлен работой цианобактерий.
Литература.

1. Isabella M. Goodchild-Michelman et al. Mater. today bio 100583 (2023). doi:10.1016/j.mtbio.2023.100583
2. Gotovtsev P.M. et al., Heliyon 2019 Sep 20;5(9):e02498. doi: 10.1016/J.HELIYON.2019.E02498

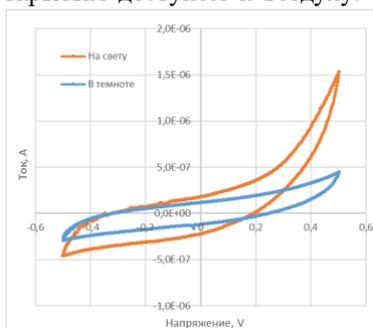


Рис. 1 Вольтамперная характеристика на свету и в темноте

ДЕЙСТВИЕ ЛИПОСОМ, СОДЕРЖАЩИХ ЭФИРЫ
АСТАКСАНТИНА, НА СЕКРЕЦИЮ ЦИТОКИНОВ
МОНОНУКЛЕАРНЫМИ КЛЕТКАМИ КРОВИ.

Малашенкова И.К., Акулова А.Р., Крынский С.А., Огурцов Д.П.

НИЦ Курчатовский Институт, arinakulova@bk.ru

Болезнь Альцгеймера является ведущей причиной деменции в пожилом возрасте. Астаксантин (АСТ) представляет собой жирорастворимый каротиноид, обладающий антиоксидантными, противовоспалительными и антиапоптотическими свойствами. Большую роль в развитии нейродегенерации играют хроническое системное воспаление, процессы избыточной активации микроглии и окислительный стресс, стимулирующие и поддерживающие гибель нейронов [1]. Эфиры АСТ, с учетом его эффектов и способности проходить через гематоэнцефалический барьер, вызывают большой интерес как потенциальное средство для профилактики и терапии ранних этапов нейродегенерации. Целью работы было изучение влияния наноэмульсий эфиров АСТ на основе фосфолипидов на секрецию важных провоспалительных медиаторов (GM-CSF (гранулоцитарно-макрофагальный колонистимулирующий фактор), цитокинов IL-1 β , IL-6) мононуклеарными клетками крови человека (МНК) через 24 ч инкубации. МНК были получены из периферической крови 6 здоровых добровольцев (мужчины, возраст 21-31 год). Уровень цитокинов определяли методом мультиплексного анализа. Инкубация МНК с наноэмульсиями без АСТ, а также с наноэмульсиями, содержащими эфиры АСТ, в отсутствие стимуляции фитогемагглютинином (ФГА) не влияла на секрецию исследованных цитокинов. При инкубации МНК без наноэмульсий ФГА повышал уровень цитокина IL-6 и GM-CSF, была тенденция к повышению IL-1 β . При добавлении к МНК, стимулированным ФГА, наноэмульсий с эфирами АСТ повышения уровня цитокинов не наблюдалось. При добавлении наноэмульсий без АСТ в пробах МНК сохранялось стимулирующее действие ФГА на секрецию цитокинов. Полученные результаты указывают на наличие противовоспалительного и иммуномодулирующего эффектов эфиров АСТ в виде наноэмульсий.

Литература.

1. E.Paouri, S. Georgopoulos, Curr Alzheimer Res. 16, 559-574 (2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЗАМОРОЗКИ ПОЛИМЕРНЫХ РАСТВОРОВ

К.Ю. Базылева*, Д.А. Волков, К.Г. Антипова

НИЦ Курчатовский Институт, bazyleva.ki18@physics.msu.ru

* Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Литье замораживанием является универсальным и доступным методом изготовления анизотропных матриц с ориентированными порами. [1] Этот метод позволяет контролировать структуру получаемых материалов за счет управления термодинамическими условиями процесса замерзания. [2] Хотя существует качественное понимание физических основ метода, многие детали происходящих в нем процессов изучены не полностью. Целью данной работы было создание установки на основе элементов Пельтье ТВ-127-1.0-1.3 для исследования процесса заморозки полимерных растворов, а также изучение морфологии полученных высокопористых материалов.

В работе использовали 8% водный раствор поливинилпирролидона (ПВП, Sigma-Aldrich, США Mw~55 kDa). Его замораживали в разработанной установке однонаправленно. Зависимость температуры от времени фиксировали с помощью сенсора Termodat-1,3М. Все замороженные материалы высушивали с использованием лиофильной сушки Martin Christ Alpha 2-4LSC в течение 72 ч при глубине вакуума 0,250 мбар.

Морфологию образцов изучали с применением сканирующей электронной микроскопии на приборе Phenom XL (ThermoFisher Scientific, США).

В результате работы была разработана и изготовлена замораживающая установка на основе элементов Пельтье. С применением разработанной установки исследована кинетика заморозки полимерных растворов и получены высокопористые материалы на основе ПВП.

Работа выполнена при поддержке государственного задания НИЦ «Курчатовский институт»

Литература.

1. Flauder S., et al., Acta Biomaterialia., 2014, p. 5148-5155.
2. Stolze C. et al., Adv. Eng. Mater., 2016, p. 111-120.

НАКОПЛЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЗАРЯДА В БАТАРЕЕ НА ОСНОВЕ БЕЛКОВ И ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ГИДРОГЕЛЕЙ

Е.А. Боброва^{1,2}, П.М. Готовцев^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
bobrova.ea@phystech.edu

Большой интерес в развитии систем накопления заряда представляет создание аккумуляторов из легко доступных перерабатываемых материалов. В качестве основы для электродов уже были рассмотрены вещества с хорошей способностью к ионному обмену [1]. Особенно зарекомендовали себя электропроводящие гидрогели, представляющие собой трехмерную структуру из сшитых полимерных цепочек. За счет данной организации гидрогели обладают высокими показателями электропроводимости [2]. Повышения емкостных показателей также можно добиться добавлением в электролит элементов, улучшающих транспорт ионов. С этой целью было проведено исследование по анализу влияния наличия белка в электролите на емкость биобатареи. В основе электродов использовался полимерный гидрогель из производного политиофена – поли-(3,4-этилендиокситиофена). В электролит, содержащий физический раствор концентрации 0,9%, был добавлен белок бычьего сывороточного альбумина. Результаты зависимости электрической емкости от концентрации белка в электролите проводились методом циклической вольтамперометрии. и представлены в таблице ниже.

Концентрация БСА, wt%	Емкость ячейки, мкФ
0,002	21
0,0025	22
0,003	29

Литература.

1. Jung, Han Young; Lee, Jeong Seok; Han, Hyun Taek; Jung, Jaehan; Eom, KwangSup; Lee, Jung Tae (2022): Lignin-Based Materials for Sustainable Rechargeable Batteries. In *Polymers* 14 (4).
2. Bianchi, Michele; Carli, Stefano; Di Lauro, Michele; Prato, Mirko; Murgia, Mauro; Fadiga, Luciano; Biscarini, Fabio (2020): Scaling of capacitance of PEDOT:PSS: volume vs. area. In *J. Mater. Chem. C* 8 (32), pp. 11252–11262.

РАЗРАБОТКА И ТЕСТИРОВАНИЕ НА ГЕРОПРОТЕКТОРНУЮ АКТИВНОСТЬ ИННОВАЦИОННОГО САХАРОЗАМЕНИТЕЛЯ НА МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ НЕМАТОД *C. ELEGANS*

Будаева М. В.¹, Тарасова Д. М.¹, Марусич Е.И.¹, Белова А.В.¹

¹Московский Физико-Технический Институт (Национальный Исследовательский Университет), Москва, budaeva.mv@phystech.edu

Разработан новый сахарозаменитель на основе аминокислот и пребиотика. Проведены стандартные исследования на модельной системе нематод *C. elegans*: влияние подсластителя на продолжительность жизни нематод, их устойчивость к стрессу [1], а также на накопление липидных капель в организмах [2]. Более того, проводится тестирование на композиционное взаимодействие сахарозаменителя с Метформином – известным геропротектором и антидиабетическим препаратом.

Результаты исследований по влиянию сахара и сахарозаменяющих веществ на продолжительность жизни нематод показали увеличение продолжительности жизни нематод под воздействием сахарозаменителя и стевии во всех концентрациях, кроме 10 мг/мл, а также для метформина в концентрациях 1.0 μM и 10 μM . Результаты исследований по влиянию сахара и сахарозаменяющих веществ на оксидативную стрессоустойчивость нематод из всех веществ только сахарозаменитель в концентрации 1 мг/мл способствовал увеличению продолжительности жизни нематод при оксидативном стрессе. Это подтверждает геропротекторную активность данной композиции и показывает ее преимущество перед сахаром и стевией.

Литература.

1. Zheng J et al. Effects of three intense sweeteners on fat storage in the *C. elegans* model. *Chem Biol Interact.* 2014 May 25;215:1-6. doi: 10.1016/j.cbi.2014.02.016. Epub 2014 Mar 13. PMID: 24632416.
2. Zhang M et al. Evaluation of the effects of three sulfa sweeteners on the lifespan and intestinal fat deposition in *C. elegans*. *Food Res Int.* 2019 Aug;122:66-76. doi: 10.1016/j.foodres.2019.03.028. Epub 2019 Mar 13. PMID: 31229125.

ПОВЕРХНОСТНАЯ МОДИФИКАЦИЯ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(L-ЛАКТИДА)

Н.В. Бычков, А.А. Захаревич

НИЦ Курчатовский Институт, nikita3262@yandex.ru

Применение полилактида в различных областях науки и производства перспективно, особенно в медицине, благодаря ряду физико-механических свойств, его разложимости в биологических средах, а также из-за его биологической совместимости с тканями человеческого организма. Однако в некоторых случаях необходимо проведение поверхностной модификации изделия для изменения свойств поверхности материала без изменения свойств материала в целом.

Один из методов поверхностной модификации полилактида [1] основан на реакции аминоллиза, в ходе которого при взаимодействии сложноэфирной связи, входящей в состав основной цепи полимера, и аминогрупп модифицирующего агента происходит разрыв сложноэфирной связи и формирование новых концевых групп. При использовании диаминов в качестве модифицирующего агента в ходе аминоллиза на месте разрыва сложноэфирной связи будет происходить формирование реакционноспособных аминогрупп, благодаря которым можно будет проводить дальнейшую модификацию поверхности полимерного материала [2].

В данной работе было исследовано влияние реакции аминоллиза на свойства поверхности полимерных пленок, губок и волокон. Материалом объектов выступал поли(L-лактид) с молекулярной массой 200 кДа. Реакцию проводили в 5 % спиртовом растворе этилендиамина при комнатной температуре при различном времени модификации. В ходе работы были исследованы краевые углы смачивания, а также структура поверхностей полимерных образцов.

Литература.

1. E.H. Baran, N.Y. Erbil, Colloids Interfaces, 3, 43 (2019)
2. A. Monnier, E.A. Tawil, Q.T.Nguyen, J.-M. Valleton, K. Fatyeyeva, B. Deschrevel, Eur. Polym. J., 107 (2018), 202-217

ФЕРМЕНТНЫЙ БИОТОПЛИВНЫЙ ЭЛЕМЕНТ, РАБОТАЮЩИЙ В РАСТВОРЕ, ИМИТИРУЮЩЕМ ПЛАЗМУ КРОВИ

Е.С. Вахницкая*, Ю.М. Парунова, П.М. Готовцев

НИЦ Курчатовский Институт, ekaterinavakhnitskaya@yandex.ru

* Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Ферментные биотопливные элементы (ФБТЭ) могут иметь широкую сферу применения: использоваться в качестве источников питания активных имплантов [1], носимых источников энергии [2], биосенсоров для мониторинга концентрации веществ в ликворе [3].

Значительным преимуществом биотопливных элементов перед традиционными аккумуляторами, обеспечивающими работу кардиостимуляторов, нейроимплантов, инсулиновых помп и т.д., является их биосовместимость и более длительный срок эксплуатации [4].

В данном исследовании была предложена концепция микроразмерного ФБТЭ на основе карбонизированной нити, который показал эффективную и продолжительную работу в условиях, близких к физиологическим условиям плазмы крови. В результате эксперимента мощность одной биотопливной ячейки составила ~ 0,6 мВт, напряжение разомкнутой цепи – 0,12 В.

Литература.

1. Sharifi M. et al. Trends of biofuel cells for smart biomedical devices //International Journal of Hydrogen Energy. – 2021. – Т. 46. – №. 4. – С. 3220-3229.
2. Jia W. et al. Epidermal biofuel cells: energy harvesting from human perspiration //Angewandte Chemie International Edition. – 2013. – Т. 52. – №. 28. – С. 7233-7236.
3. Ruff A. et al. A self-powered ethanol biosensor //ChemElectroChem. – 2017. – Т. 4. – №. 4. – С. 890-897.
4. Singh R., Kaur N., Singh M. Bio-compatible bio-fuel cells for medical devices //Materials Today: Proceedings. – 2021. – Т. 44. – С. 242-249.

ЭЛЕКТРОЧУВСТВИТЕЛЬНАЯ СУСПЕНЗИЯ НАНОКОМПОЗИТА ГРАФЕН-ХИТОЗАН

П.А. Вовкотруб, Д.Ю. Столярова, В.В. Ломовкин, А.Ю. Вдовиченко,
С.Н. Чвалун

Национальный исследовательский центр "Курчатовский
институт", vovkotrub.pa@phystech.edu

Электрореологические жидкости (ЭРЖ) – жидкодисперсные материалы, изменяющие свое реологическое поведение под действием внешнего электрического поля. В данной работе был предложен новый наполнитель для ЭРЖ – нанокпозиционные частицы на основе оксида графена модифицированного низкомолекулярным полисахаридом – хитозаном.

Наноккомпозит, диспергировали в полидиметилсилоксане низкой вязкости. Концентрацию наполнителя изменяли от 0,33 до 0,75 масс.%. Исследование структуры суспензий вне и под действием внешнего электрического поля (ВЭП) в 1 кВ/мм проводили с помощью оптической просвечивающей микроскопии для разбавленного образца концентрацией 0,1 масс.%. Кривые течения и вязкости получали с помощью ротационного реометра Physica MSR 501 (Anton Paar GmbH, Германия) с высоковольтным внешним источником постоянного напряжения. Объем измерительной ячейки – 20 мл, зазор 1 мм, напряженность электрического поля варьировали в диапазоне от 0 до 7 кВ/мм, с шагом от 0,25 кВ/мм.

Для всей серии образцов были определены значения пределов текучести и динамических вязкостей в полном диапазоне значений ВЭП. Реологические испытания показали, что при отсутствии ВЭП характер течения суспензий соответствует ньютоновским жидкостям. Под действием ВЭП образцы проявляли свойства вязкоупругих тел: наблюдали появление и рост пределов текучести и динамической вязкости. Таким образом, было установлено, что полученные суспензии обладают выраженными электрореологическими свойствами. ЭРЖ с концентрацией наполнителя 0,75 масс.% демонстрировала самые высокие значения пределов текучести вплоть до 1 кПа.

Выполнено при финансовой поддержке Госзадания НИЦ «Курчатовский институт»

АКТИВАЦИЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОГО ИММУНОГО ОТВЕТА ПРИ ПОМОЩИ НАГРУЖЕННЫХ ЭКЗОГЕННЫМ HSP70 ВЕЗИКУЛ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Гараева Л.А.^{1,3,4}, Комарова Е.Ю.², Емельянова С.С.¹, Гужова И.В.², Маргулис Б.А.², Коневега А.Л.^{1,3,4}, Штам Т.А.^{1,2,3}

1. НИЦ «Курчатowski институт»- ПИЯФ, garaeva.laa@npri.nrcki.ru;
2. Институт цитологии РАН;
3. НИЦ Курчатowski Институт;
4. Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Одним из перспективных направлений терапии опухолевых новообразований является активация противоопухолевого иммунитета, в том числе основанная на использовании экзогенного белка HSP70, способного спровоцировать активацию цитотоксических лимфоцитов [1]. Растительные везикулы могли бы стать эффективными доставщиками экзогенного HSP70 к клеткам опухоли. [2].

В ходе работы при помощи проточной цитометрии было показано на клеточных моделях, что экзогенный белок, доставленный при помощи везикул грейпфрута (GF-EVs), накапливается более эффективно в клетках человека, по сравнению со свободно добавленным. На мышинных моделях (Balb/c) был продемонстрирован противоопухолевый эффект от нагруженных HSP70 GF-EVs, о чем свидетельствовало снижение скорости роста опухоли минимум в 2 раза ($p=0.03$) в экспериментальной группе мышей, которым прививали клетки колоректального рака CT26 с везикулами грейпфрута, нагруженными HSP70. Доказательством того, что данный эффект обусловлен активацией противоопухолевого иммунного ответа, явилось увеличение скорости гибели клеток CT26 *in vitro* после добавления цитотоксических лимфоцитов (CD8+), выделенных из селезенки мышей именно экспериментальной группы.

Таким образом, внеклеточные везикулы грейпфрутового происхождения эффективно доставляют к клеткам млекопитающих экзогенный HSP70 с сохранением его способности к активации противоопухолевого иммунного ответа.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-74-20146).

Литература:

1. Guzhova I. et al. HSP70-based anti-cancer immunotherapy// Hum Vassin Immunother. 2016. V.2. No. 12(10):2529-2535
2. Garaeva L. et al. Delivery of functional exogenous proteins by plant-derived vesicles to human cells *in vitro*// Sci Rep 2021. 11, 6489.

ПОЛЕВЫЕ ИСПЫТАНИЯ ТЕХНОЛОГИИ УПЛОТНЕНИЯ ПОЧВ С ПОМОЩЬЮ БАКТЕРИАЛЬНОЙ СМЕСИ

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»

²Курчатовский геномный центр — ПИЯФ, golovkina_da@pnpi.nrcki.ru

Для удовлетворения растущих требований в сфере гражданского строительства необходимо обеспечить высокие механические свойства природных грунтов. Традиционно эту проблему решают с использованием различных химических добавок. В настоящее время в качестве альтернативы появились исследования по уплотнению почвы при помощи минералообразующих микроорганизмов или биоцементации грунта. В результате этого процесса улучшаются геотехнические свойства почвы за счет связывания почвенных частиц образованными микроорганизмами кристаллами карбоната кальция [1].

Целью данной работы была разработка технологии повышения прочностных характеристик почвы с помощью микроорганизмов и ее адаптация к полевым условиям. В ходе работы, после подготовительных лабораторных исследований, на опытных участках почвы были проведены испытания по улучшению их механических свойств. На участке, обработанном бактериальной смесью и цементирующим раствором в 2 этапа, прочностные характеристики, значения коэффициента фильтрации и количество карбоната кальция превысили контрольный образец (обработанный водой) в два раза. В связи с изменением сезонных климатических условий на открытом воздухе, эксперимент был повторен в помещении с заданными контролируемыми условиями для образцов почвы объемом 0,06 м³. Улучшение прочностных характеристик грунта также в 2 раза было продемонстрировано для образца, обработанного бактериальной смесью и цементирующим раствором.

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., et al. Bio-mediated soil improvement. *Ecol. Eng.*, 2010. 36:197–210.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ КОМПЛЕКСОВ ОКСИГЕМОГЛОБИНА ПУТЕМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА XANES-СПЕКТРОВ

А.В. Горячевский^{1,2}, Л.П. Суханов^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский Институт», goryachevsky94@gmail.com

² Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет)

Выполненные в НИЦ «Курчатовский институт» экспериментальные исследования плёнок оксигемоглобина [1, 2] на поверхности жидкости делают актуальной интерпретацию XANES [3] спектров для моделирования процессов, происходящих в ближней координационной сфере Fe-центра оксигемоглобина. Новизной исследования является разработка оригинальной расчётной методики.

Методом B3LYP/6-31G [4] выполнен квантово-химический расчет синглетного кластера (заряд +2), моделирующего ближнее окружение Fe-центра оксигемоглобина. Расчёты проводились с частичной оптимизацией геометрии в отсутствие и в присутствии молекул воды. Рассчитанные расстояния Fe-N в порфириновом кольце согласуются с измеренными [5] в пределах погрешностей эксперимента. Молекулы воды образуют с кластером водородные связи с энергией ~10 ккал/моль на одну молекулу. Так как водородные связи с молекулой кислорода влияют на ее расположение в кластере [6], для установления характера изменений спектра при помощи пакета FDMNES [3] были построены XANES-спектры полученных конфигураций. Молекулы воды слегка деформируют окружение Fe-центра, и это возмущает спектр в области белой линии и вдали от края поглощения. Структура окружения Fe-центра белка в присутствии воды может отличаться от таковой в белковом кристалле [6], что указывает на важность XANES-исследований.

Литература.

1. Novikova N.N., et al. // J. Phys. Chem. B, 123, 8370 (2019).
2. Novikova N.N., et al. // Crystallography Reports, 64, № 6, 952 (2019).
3. Joly Y. // Phys. Rev. B. Cond. Matter Mater. Phys., 63, 125120 (2001).
4. Frisch M.J., et al. Gaussian 09, Revision A.02. // Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
5. Lima F., et al. // Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 1617 (2014).
6. Wilson S.A., et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 110, 16333 (2013).

НОВЫЕ КОЛЛОИДНЫЕ НОСИТЕЛИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПОЛИКОМПЛЕКСОВ

И.В. Григорян^{1,2*}, В.В. Спиридонов¹, А.М. Адельянов¹,
Ю.А. Кокшаров^{1,2}, К.В. Потапенков¹, И.В. Таранов², Г.Б. Хомутов^{1,2},
А.А. Ярославов¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Москва, Россия *e-mail: grigorian.iv19@physics.msu.ru

²Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова
РАН, Москва, Россия

В данной работе представлены новые коллоидные носители лекарственных соединений на основе биосовместимых магнитных поликомплексов. В качестве полимерной основы используются молекулы полиакриловой кислоты различной молекулярной массы, модифицированных биогенным полиамином спермином.

В ходе работы были получены изображения и определены основные физико-химические характеристики поликомплексов. Была продемонстрирована возможность включения в поликомплексы лекарственных соединений на примере противоопухолевого антибиотика доксорубина. Проанализированы оптические спектры поглощения поликомплексов. Методом ЭПР исследованы магнитные свойства поликомплексов, функционализированных магнитными наночастицами оксида железа.

Литература.

1. Spiridonov V.V. et al. Magnetosensitive Water-Soluble Nanocomposite Based on Sodium Alginate and Fe₂O₃ Nanoparticles // *Macromolecular Symposia*. Vol. 389, № 1, 2020
2. D.A. Gorin et al. Effect of Microwave Irradiation on Composite Iron Oxide Nanoparticle/Polymer Microcapsules // *Proc. of SPIE* Vol. 6536, 2007.
3. Yu. A. Koksharov et al. Low temperature electron paramagnetic resonance anomalies in Fe-based nanoparticles // *Journal of Applied Physics*. Volume 88, Number 3. 1 august 2000.
4. Koksharov Yu. A., Gubin S.P., Taranov I.V., Khomutov G.B., Gulyaev Yu V. Magnetic Nanoparticles in Medicine: Progress, Problems, and Advances // *Journal of Communications Technology and Electronics*. Volume 67, Number 2. 2022

ГИПОКСИЯ В ТЕРАПИИ КОЖНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

К.А. Дариенко, Е.А. Тверье, А.А. Пантелеев*

НИЦ Курчатовский Институт, darcrystal@gmail.com

В настоящее время в тканевой инженерии используется множество подходов к лечению патологий кожи. Популярным является использование клеток кожи, подвергнутых воздействию гипоксии, для стимуляции пролиферации и дифференцировки.

В настоящей работе было использовано 2 типа клеток - фибробласты (Fb) и кератиноциты (Krt) линии HaCat для стимуляции экспрессии генов, кодирующих белки внеклеточного матрикса, белки NIF-каскада, металлопротеиназы и гены, отвечающие за дифференцировку. Было обнаружено, что кратковременное культивирование Fb в гипоксических условиях (3-6 ч, 1% O₂) повышает уровень экспрессии генов, важных для ранозаживления (Col, Vegf, TGF, MMPs, Col3, Fn) [1], а также не вызывает развития осложнений, свойственных продолжительному воздействию гипоксии [2]. В Krt краткосрочная гипоксия одновременно повышает экспрессию генов, отвечающих за дифференцировку (K1, K10, IVL), и экспрессию гена убиквитинлигазы Siah1, активирующего Hif1a; вместе с этим, была показана ко-локализация этих белков в слоях эпидермиса, где идет активная дифференцировка. Вероятно, клетки этих слоев находятся в гипоксии. Эти данные могут лечь в основу разработки метода лечения кожных заболеваний, связанных с нарушением дифференцировки кератиноцитов.

Дальнейшее ко-культивирование (совместное) этих клеток с созданием упрощённой двухслойной модели кожи с дальнейшей трансплантацией в зону повреждения может быть использовано в качестве нового подхода для стимуляции процессов пролиферации и дифференцировки, например, при лечении хронических диабетических язв.

Литература.

1. H.C. Du, et al. Growth factor-reinforced ECM fabricated from chemically hypoxic MSC sheet with improved in vivo wound repair activity. *Biomed Res Int.* 2017, 2017:2578017.
2. Province P., et al. Hypoxia, Angiogenesis and Mechanisms for Invasion of Malignant Gliomas. *Evolution of the Molecular Biology of Brain Tumors and the Therapeutic Implications 2.* 2017, P. 106–123.

ВЛИЯНИЕ ДВУХВАЛЕНТНОГО ЖЕЛЕЗА НА АСТАКСАНТИН, ВКЛЮЧЁННЫЙ В ЛИПИДНЫЕ ЧАСТИЦЫ, В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ РАЗМЕРА

А.Г. Дудник¹, Н.Ю. Лотош¹, А.А. Селищева^{1,2}, Е.А. Куликов¹

¹ НИЦ Курчатовский Институт, agdudnik@mail.ru

² МГУ им. М.В. Ломоносова

Астаксантин (АСТ) – биологически активное вещество [1], представляет интерес для исследования как антиоксидант при перекисном окислении липидов (ПОЛ), индуцированном Fe^{2+} .

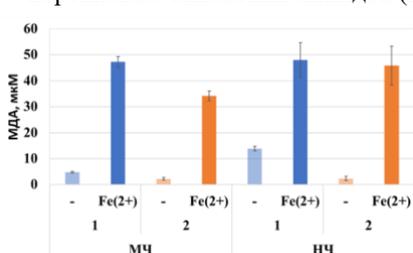


Рисунок. МДА в ЛЧ (1- без АСТ, 2 - S75:АСТ 2500:30 мкМ) при окислении липидов с 0,1 мМ Fe^{2+} . Ср. знач. \pm SD

Липидные частицы (ЛЧ) готовили из фосфолипида S75 (Lipoid GmbH, Германия) и АСТ (Sigma Aldrich, Германия). Получены микрочастицы (МЧ) размером $464,7 \pm 149,0$ нм (Pdi 0,725) и наночастицы (НЧ) - $106,5 \pm 52,37$ (Pdi 0,213). Конфокальная флуоресцентная микроскопия показала, что МЧ содержат многослойные частицы до 30 мкм.

Исследовали кинетику обесцвечивания АСТ в ЛЧ при инкубировании с 0,1 мМ Fe^{2+} . В случае НЧ АСТ обесцвечивается гораздо быстрее, чем АСТ, включённый в МЧ. Скорости реакции обесцвечивания были 0,05 и 0,002 мМ/мин соответственно. ЛЧ инкубировали с 0,1 мМ Fe^{2+} 2 ч и определяли содержание малонового диальдегида (МДА). Показано, что в НЧ АСТ не влиял на МДА, тогда как в случае МЧ МДА снижался. Стоит обратить внимание, что в отсутствие железа АСТ в НЧ проявляет антиоксидантную активность (рис).

Результаты позволяют сделать вывод, что при встраивании в МЧ АСТ может проникать в более глубокие липидные слои и в этом случае он становится труднодоступным для железа и проявляет антиоксидантную активность в отношении ПОЛ, тогда как в НЧ АСТ легкодоступен для окисления.

Работа выполнена при поддержке тем. плана НИЦ «Курчатовский Институт» «Фундаментальные исследования в области биоэнергетики 1.9ф.».

Литература.

1. Т.Н.Р. Brotosudarmo, et al., Int. J. Food Sci., 2020, p. 1-16.

ВЛИЯНИЕ ЭКСТРАКТОВ ИЗ БУРЫХ ВОДОРОСЛЕЙ И ЛИШАЙНИКА НА МИКРОБИОМ *SCOBY* И СВОЙСТВА КОМБУЧИ

А.М. Барсегян, Д.А. Головкина, Ф.К. Ермилов, Е.В. Журишкина, А.Е. Комиссаров, А.А. Кульминская, И.М. Лапина

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, ermilov.filipp03@gmail.com

В рацион питания современного человека всё чаще входит освежающий напиток «комбуча», который является конечным результатом ферментации чая путём добавления закваски бактерий и дрожжей *SCOBY* в чайный отвар и последующего инкубирования. Для придания ферментированным напиткам дополнительных полезных свойств используют разнообразные добавки к чаю, обладающие иммуномодулирующей, антимикробной и противовоспалительной активностью. До сих пор нет полной ясности, как введение новых веществ в процесс ферментации повлияет на микробиом *SCOBY*.

Цель данного проекта состоит в исследовании влияния экстракта бурых водорослей *Fucus vesiculosus*, экстракта лишайника *Cetraria islandica*, а также их смеси на микробиом *SCOBY* и свойства будущего напитка.

В ходе исследования [1] производился контроль изменения pH, содержания полифенолов и антиоксидантной активности, анализ химического состава напитков, метагеномный анализ образцов культур и органолептический анализ полученных напитков среди 18-ти испытуемых.

В результате выявлено, что внесение экстракта водорослей увеличивает разнообразие микробиома культуры *SCOBY* и снижает pH напитка. Во всех комбучах с растительными добавками общая доля дрожжей была снижена по сравнению с контролем. Общее содержание полифенолов и антиоксидантная активность напитков с добавлением растительных экстрактов и без них были сопоставимы. Результаты этого исследования указывают на потенциал водорослей и лишайников в качестве функциональных добавок для получения безалкогольных ферментированных напитков с дополнительной нутрицевтической ценностью.

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

Литература

1. Golovkina, D.A.; Zhurishkina, E.V.; Ayrapetyan, O.N.; Komissarov, A.E.; Krylova, A.S.; Vinogradova, E.N.; Toshchakov, S.V.; Ermilov, F.K.; Barsegyan, A.M.; Kulminskaya, A.A.; Lapina, I.M. Effect of Brown Algae and Lichen Extracts on the *SCOBY* Microbiome and Kombucha Properties. *Foods* **2023**, *12*, 47.

СОЗДАНИЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИОГЕННЫХ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В РАЗЛИЧНЫХ ПРЕПАРАТИВНЫХ ФОРМАХ

О.А. Журавлева¹, А.Ю. Власова^{1,2}, Т.А. Кочетова²

¹НИЦ «Курчатовский Институт», Курчатовский комплекс генетических исследований (ГосНИИгенетика),
zhuravlevaolgga@gmail.com

²«РТУ – МИРЭА», Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова

Промышленные технологии получения наноматериалов требуют использования новых, экологически безопасных и дешевых методов синтеза. В последние годы активное развитие получило новое технологическое направление, основанное на использовании микроорганизмов как биокатализаторов синтеза наноструктур, стабилизированных молекулами природного происхождения [1].

В настоящей работе предложен эффективный способ биовосстановления ионов серебра в водном растворе AgNO_3 до наночастиц серебра (NPsAg) в присутствии живых клеток бактерии *Shewanella oneidensis* MR-1 и секретируемых ими белков. Биогенные NPsAg диаметром 10–15 нм были получены в двух агрегатных состояниях: (1) в виде стабильных водных суспензий; (2) в сухом порошкообразном лиофилизированном виде. Биогенные NPsAg в обеих препаративных формах показали антимикробную активность, что стало основанием для введения NPsAg в полимерные матрицы. Имобилизация отрицательно заряженных NPsAg в водных суспензиях успешно произведена на полистирольные сильноосновные аниониты Dowex 1×1, АВ-17-2П, имеющие на поверхности активные $(-\text{N}^+(\text{CH}_3)_3)$ группы. Лиофилизированные порошкообразные формы введены в эпоксидную смолу и акриловые красители. Полученные композиты, содержащие NPsAg, демонстрировали бактерицидную активность, что свидетельствует о возможности модификации полимерного носителя с целью создания антибактериального нанокompозитного материала нового типа.

Исследование проведено при поддержке утвержденного Тематического плана НИЦ КИ №35.3.1-вн от 07.10.22.

Литература.

1. G. Gahlawat, et al., J. RSC Adv., 2019, p. 12944-12967.

БОРОГИДРИДНОЕ СНЯТИЕ ФТАЛОИЛЬНОЙ ЗАЩИТЫ С
АМИНОГРУПП ХИТОЗАНА КАК «ЗЕЛЕНАЯ» АЛЬТЕРНАТИВА
ГИДРАЗИНОЛИЗУ

Захаревич А.А.^{1,2}, Бычков Н.В.¹, Ногайдели В.В.²

¹НИИ Курчатовский Институт,

²МИРЭА – Российский технологический университет

bestiamalum@yandex.ru

Гидразинолиз – метод снятия фталоильной защиты при селективной модификации хитозана по аминогруппам. При этом гидразин является веществом 1 класса опасности и его применение не согласуется с концепцией устойчивого развития. В настоящей работе предложен метод восстановления имидных групп фталоилированного хитозана с использованием борогидрида натрия. Замена токсичных реагентов на менее опасные необходима в рамках концепции зеленой химии.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИИ «Курчатовский институт».

Литература

1. Tao S.et al. Synthesis, characterization and slow release properties of O-naphthylacetyl chitosan // Carbohydr. Polym. 2012. V. 88. PP. 1189– 1194.
2. Алферова Н.А. и др. Зеленая химия и тенденции ее развития // Успехи в химии и химической технологии. 2017. № 15. С. 84 – 85.

ПОСТРОЕНИЕ ФОРМАЛЬНОЙ НЕЙРОМОРФНОЙ СЕТИ НА
ОСНОВЕ МАССИВА КРОССБАР-МЕМРИСТОРОВ
(Co-Fe-B)_x(LiNbO₃)_{100-x}

А. И. Ильясов^{1,2*}, К. Э. Никируй¹, А. В. Емельянов¹,
К. Ю. Черноглазов¹, А. В. Ситников¹, В. В. Рыльков¹, В. А. Демин¹

¹НИЦ “Курчатовский институт”, 123812 Москва, Россия

²МГУ им. М.В. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

*sashailyasov99@gmail.com

Мемристоры — перспективные устройства микроэлектроники, способные изменять своё резистивное состояние при приложении напряжения, и сохранять его после прекращения внешнего воздействия [1]. Это свойство мемристоров делает их прекрасными кандидатами для использования в качестве синапсов в нейроморфных сетях (НС), в том числе формальных (ФНС). Применение мемристоров в них позволяет избежать выполнения самой энергозатратной операции — чтения/записи весов связей в память.

В работе изучены массивы кроссбар-мемристоров на основе (Co-Fe-B)_x(LiNbO₃)_{100-x} [2]. Были измерены их вольт-амперные характеристики, время удержания состояний, пластичность, устойчивость к циклическим переключениям, а также кинетика их резистивных переключений. После этого была создана простая ФНС 4-2 на основе мемристоров массива, которая была обучена распознаванию образов «0101» и «1010». Была показана успешность распознавания даже в случае зашумленного сигнала – когда один из битов образа оказывается инвертирован. Полученные в данной работе результаты улучшают понимание процесса резистивного переключения в нанокompозитных мемристорах, и могут быть продолжены в сторону созданию мемристорных ФНС большего размера и сложности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-79-10253) на оборудовании Ресурсного центра электрофизических методов (НИЦ "Курчатовский институт").

Литература.

1. Strukov D.B. et al. Nature. 2008. V. 453. № 7191. P. 80.
2. Piyasov A.I. et al. Nanobiotechnology Reports. 2022. V. 17. № 1. P. 118.

ВЛИЯНИЕ СЛОЕВ МИКРО- И НАНОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ С РАЗЛИЧНОЙ ГЛУБИНОЙ И МОРФОЛОГИЕЙ ПОР НА КОНТАКТНЫЙ УГОЛ, АДГЕЗИЮ И ЖИЗНЕСПОСОБНОСТЬ КЛЕТОК

А.Р. Илясов¹, В.В. Старков, Е.А. Гостева¹

¹НИТУ МИСИС, ilyasov.1997@inbox.ru

²ИПТМ РАН

Использование структурированных кремниевых подложек в качестве модельных каркасов перспективно для систематического изучения роли микро/наноморфологии в адгезии и росте клеток. В данной работе мы создали нано- и микроструктурированные пористые слои на кремниевых пластинах с помощью электрохимического травления. Затем мы исследовали влияние глубины и размера пор на краевой угол смачивания, адгезию клеток и их жизнеспособность. Мы обнаружили, что разная пористость способствует разной адгезии клеток. Клетки сильнее прилипают к пластинам в случае нанопор и слабее – к микропорам. Нанопористые слои были гораздо более гидрофильными по сравнению с микропористыми.

Литература.

1. Zhou J et al (2018) The effects of surface topography of nanostructure arrays on cell adhesion. *Phys Chem Chem Phys* 20(35):22946–22951. <https://doi.org/10.1039/C8CP03538E>
2. Robotti F et al (2018) A micron-scale surface topography design reducing cell adhesion to implanted materials. *Sci Rep* 8(1):1–13. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-29167-2>
3. Gosteva E, Ilyasov A, Sedlovets D, Starkov V (2021) Nanostructured surface's cytotoxicity study of silicon wafers to mammalian cells. 2021 IEEE Int. Conf. Manip. Manuf. Meas. Nanoscale, pp 441–444 <https://doi.org/10.1109/3M-NANO49087.2021.95997>

СОЗДАНИЕ МЕМРИСТОРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ АМОРФНОГО КРЕМНИЯ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО ОСАЖДЕНИЯ

Д.В. Ичѣткин, М.Е. Ширяев*, Д.В. Новиков*, Е.А.
Лебедев*, К.Ю. Черноглазов, В.В. Рыльков

НИЦ Курчатовский Институт, ichetkin.d@haclever.org
* Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

В настоящее время происходит рост обработки данных и для этого требуются специальные вычислительные устройства с высокой энергоэффективностью. Одним из вариантов реализации таких аппаратных ускорителей являются системы на основе мемристоров. Но из-за проблем, таких как нестабильность циклических резистивных переключений (РП) и короткое время хранения резистивных состояний стоит вопрос поиска материалов с оптимальными характеристиками. Одним из перспективных материалов для производства мемристоров является аморфный кремний с верхним контактом из сплава серебра/меди (Ag : Cu = 50 : 50 об.%) [1].

Была разработана мемристивная структура, представленная на рис 1а. Для создания слоя 5-нм аморфного Si и защитного слоя 300 нм слой Cr использовалась установка магнетронного осаждения.

Продемонстрировано, что данная структура имеет стабильные РП на рис 1б с отношением R_{off}/R_{on} порядка 1000 в положительных напряжениях и R_{on}/R_{off} порядка 10 в отрицательной части.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №22–29-00392) на оборудовании ресурсных центров (НИЦ «Курчатовский институт»).

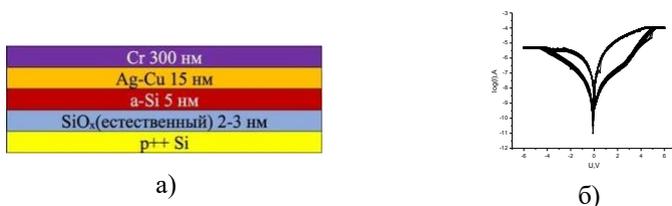


Рис.1. Мемристор Cr/Ag-Cu/a-Si/SiO_x/p++ Si. а) схематичное изображение структура б) ВАХ мемристора

Литература.

1. Yeon, H., Lin, P., Choi, C. et al. Alloying conducting channels for reliable neuromorphic computing. Nat. Nanotechnol. 15, 574–579 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41565-020-0694-5>

ИССЛЕДОВАНИЕ АДГЕЗИИ ПЕРВИЧНОЙ НЕЙРОНАЛЬНОЙ КУЛЬТУРЫ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕМ ГИДРОГЕЛЕ НА ОСНОВЕ PEDOT:PSS

Д.А. Кириллова, А.О. Романов, П.М. Готовцев

НИЦ Курчатовский Институт, d-kirillova@mail.ru

Поли(3,4-этилендиокситиофен)полистиролсульфонат (PEDOT:PSS) вызывает интерес к тканевой инженерии благодаря возможности наделить традиционные биоматериалы электропроводящими свойствами. PEDOT:PSS биосовместимые гидрогели характеризуются улучшенным прикреплением и жизнеспособностью клеток [1] и сниженной реакцией на инородное тело [2].

Целью настоящего исследования был сравнительный анализ адгезии и выживаемости первичной нейрональной культуры клеток электропроводящем гидрогеле на основе PEDOT:PSS.

Изучение воздействия морфологии поверхности гидрогеля на адгезию клеток осуществлялось методом иммуногистохимического окрашивания с последующей флуоресцентной микроскопией. Применение комплементарных микроскопических методов в конечном итоге позволило получить визуализацию расположения клеток на трехмерной структуре гидрогеля. На рисунке 1 продемонстрированы клетки первичной нейрональной культуры, адгезированные на поверхности электропроводящем гидрогеле на основе PEDOT:PSS.

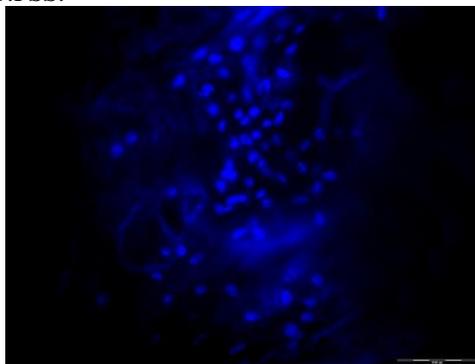


Рис. 1. Клетки первичной нейрональной культуры (ядра окрашены синим) на поверхности электропроводящем гидрогеле на основе PEDOT:PSS.

Литература.

1. Ramuz M. et al. Monitoring of cell layer coverage and differentiation with the organic electrochemical transistor // J. Mater. Chem. B. 2015.
2. Ferlauto L. et al. Development and characterization of PEDOT:PSS/alginate soft microelectrodes for application in neuroprosthetics // Front. Neurosci. 2018.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ PLA/PCL/HA ДЛЯ РЕГЕНЕРАТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ: ПОЛУЧЕНИЕ, ИССЛЕДОВАНИЕ, 3D-ПЕЧАТЬ

Дмитряков П.В.¹, Князев Н.В.^{1,2}, Крупнин А.Е.¹, Малахов С.Н.¹,
Седуш Н.Г.¹, Хмелевский А.А.^{1,2}.

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
E-mail: knyazev.200013@gmail.com

²Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), E-mail: knyazev.200013@gmail.com

Важным направлением регенеративной медицины является применение скаффолдов для восстановления дефектов костных тканей. Актуальной задачей остается поиск материалов, которые должны соответствовать ряду требований: биосовместимость, биоактивность, контролируемый процесс биодеградации, нетоксичность продуктов разложения, сопоставимость механических свойств с нативной костной тканью[1].

Использование композиционных материалов с полимерной матрицей и неорганическим наполнителем может позволить нивелировать недостатки широко используемых биосовместимых полимерных материалов и биокерамик, при этом сохранив их основные преимущества. [1].

Целью данного исследования является получение новых композиционных материалов на основе полилактида (PLA) и поликапролактона (PCL), наполненных частицами гидроксиапатита (HA) и обсуждение влияния состава матрицы и концентрации наполнителя на физико-химические свойства и температурные диапазоны переработки при 3D-печати. Физико-химические свойства образцов были исследованы методами дифференциальной сканирующей калориметрии, термогравиметрического анализа, гелепроникающей хроматографии и инфракрасной спектроскопии.

Авторы благодарят ресурсные центры «Оптика» и «Полимер» ОРЦ ККНИБКС-ПТ. Исследование выполнено при финансовой поддержке Госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

Литература.

1. HosseiniFS, NairLS, LaurencinCT. Inductive Materials for Regenerative Engineering. J Dent Res. 2021 Sep;100(10):1011-1019.

ОЦЕНКА СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА ПАЦИЕНТОВ С ДИАГНОЗОМ ШИЗОФРЕНИИ В ХОДЕ ТМС-ТЕРАПИИ

Д. А. Ковалишина, С. И. Карташов

НИЦ Курчатовский Институт, kovalishina.d@gmail.com

Транскраниальная магнитная стимуляция (ТМС) представляется эффективным вариантом лечения негативных симптомов у пациентов с шизофренией [1]. Физиологические показатели эффективности ТМС-терапии (структурные изменения) можно оценить с помощью различных техник магнитно-резонансной томографии, одной из которых является диффузионная МРТ.

В данном исследовании были оценены матрицы коннективности различных областей мозга, построенные на основе данных диффузионной МРТ. Данные были получены у пациентов с диагнозом шизофрении до ТМС-терапии, сразу после окончания терапии и через полгода после окончания терапии. Обработка и вычисление матриц осуществлялось с помощью open-source программного пакета MRTRix3 [2].

Матрицы коннективности отражают структурные связи головного мозга. Изменения в матрицах отражают структурные изменения, связанные с ТМС-терапией. Вопросами дальнейшего исследования являются сравнение структурных изменений пациентов с диагнозом шизофрении и здоровых добровольцев, а также применение теории графов для анализа матриц коннективности [3].

Литература.

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

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ВИСМУТА ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ К РАКОВЫМ КЛЕТКАМ С ГИПЕРЭКСПРЕССИЕЙ HER2

Короткова Н. А.^{1,2}, Котельникова П.А.², Кабашин А.В.¹, Деев С.М.^{1,2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
korotkovaha@yandex.ru

²Институт биоорганической химии имени академика М.М. Шемякина-Овчинникова РАН

Благодаря высоким коэффициентам поглощения в широком диапазоне длин волн и высокой эффективности фототермического преобразования наночастицы (НЧ) Bi могут применяться для радио- и фотосенсибилизации [1,2]. В ходе работы было опробовано покрытие наночастиц силан-полиэтиленгликолем-СООН. Полимер стабилизировал наночастицы в воде и фосфатно-солевом буфере. В качестве поверхностного опухолевого маркера был выбран рецептор HER2 [3]. Для доставки висмута к опухолевым клеткам поверхность наноструктуры модифицировали нацеливающими агентами: антителом Трастузумаб и каркасными белками DARPIn и аффибоди. Карбоксильная группа полимера способствовала присоединению аминокислотной группы белка-мишени. Методом проточной цитометрии определено специфичное связывание нацеленных НЧ Bi с клетками со сверхэкспрессией HER2. Полученные МТТ-тестом значения токсичности позволяют заключить, что даже покрытые полимером НЧ Bi являются токсичными. Эти данные необходимо учитывать при расчете вводимого агента при *in vivo* исследованиях.

Литература.

1. Bulmahn J. C. et al. Laser-ablative synthesis of stable aqueous solutions of elemental bismuth nanoparticles for multimodal theranostic applications //Nanomaterials. – 2020. – Т. 10. – №. 8. – С. 1463.
2. Shahbazi M. A. et al. The versatile biomedical applications of bismuth-based nanoparticles and composites: therapeutic, diagnostic, biosensing, and regenerative properties //Chemical Society Reviews. – 2020. – Т. 49. – №. 4. – С. 1253-1321.
3. Mitri Z., Constantine T., O'Regan R. The HER2 receptor in breast cancer: pathophysiology, clinical use, and new advances in therapy //Chemotherapy research and practice. – 2012. – Т. 2012.

СОЗДАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНОГО РАНОЗАЖИВЛЯЮЩЕГО ПРЕПАРАТА НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ ХИТОЗАН-ФИКОЦИАНИН

А.А. Захаревич¹↓ А.И. Кошкалда², Л.А. Петрова³, Я.Э. Сергеева^{1,4}

¹ НИЦ Курчатовский Институт

² РХТУ им. Д.И. Менделеева, a.koshkalda@bk.ru

³ Московский Политехнический Университет (Московский Политех)

⁴ Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)

Анализ литературы по гемостатическим исследованиям выявил растущую потребность в ранозаживляющих материалах, обладающих высокой безопасностью и эффективностью [1], в числе которых рассматриваются пленки, гели, губки, содержащие микрокапсулы активного вещества. Одним из перспективных полимерных носителей является хитозан, биосовместимость и механическая стабильность которого позволяют формировать на его основе прочные и нетоксичные системы с пролонгированным выделением активного вещества [2]. В качестве активного вещества может быть использован С-фикоцианин (С-ФЦ) – вспомогательный пигмент цианобактерий и красных водорослей, обладающий высокой антиоксидантной активностью. Кроме того, был доказан положительный эффект терапевтического использования С-ФЦ в качестве ранозаживляющего средства [3].

Цель работы – исследование возможности создания покровных ранозаживляющих материалов на основе хитозана путем введения С-ФЦ, выделенного из биомассы цианобактерии *Arthrospira platensis* V-12619, в полимерные пористые губки. В ходе проведения исследования испытаны различные концентрации растворов С-ФЦ, проведена оценка эффективности включения С-ФЦ в хитозановые губки, определена нагрузочная способность (мкг/мг) испытываемых полимерных пористых губок, установлена динамика высвобождения С-ФЦ из полимерного носителя, определены характеристики С-фикоцианина после выхода из хитозановых губок.

Литература

1. A. Dev, et al, Acta Biomater., 2020, p. 121-131.
2. R. R. Yan, et al, Colloids Surfaces B Biointerfaces, 2022, 112770.
3. Н. К. Madhyastha, et al, J. Cell. Mol. Med., 2008, p. 2691-2703.

ДЕЙСТВИЕ С-ФИКОЦИАНИНА НА ОКИСЛИТЕЛЬНЫЙ СТРЕСС ДРОЖЖЕЙ

Иващенко М.В.¹, Кувырченкова А.П.², Рогов А.Г.², Сергеева Я.Э.^{2,3},
Сухинов Д.В.²

1 Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

2 НИЦ «Курчатовский институт», nastya_kuvirchenkova@mail.ru

3 Национальный исследовательский университет «МФТИ»

С-фикоцианин (С-ФЦ) является одним из компонентов фотосинтетического аппарата цианобактерий, обладает антиоксидантными, противоопухолевыми и противовоспалительным свойствами [1], а также часто используется в различных медицинских исследованиях [2].

Целью настоящего исследования было изучение внутриклеточного действия С-ФЦ, полученного из цианобактерий *Arthrospira platensis*, на уровне окислительного стресса и гибели клеток дрожжей аэробного типа обмена *Yarrowia lipolytica*, подвергнутых действию прооксидантов.

В работе было показано накопление С-ФЦ в клетках дрожжей и проявление прямого антиоксидантного действия на суспензию дрожжевых клеток в диапазоне концентраций 10-100 мкг/мл. При дальнейшем увеличении концентрации С-ФЦ обладал цитотоксическим эффектом. В качестве контроля дрожжи инкубировали с мембранотропным митохондриально-направленным катионом 800 нМ SkQ1, для которого ранее было показано сильное антиоксидантное действие на суспензию дрожжей *Yarrowia lipolytica* [3]. Наиболее выраженное антиоксидантное действие С-ФЦ проявлял в концентрации 20 мкг/мл, что было сопоставимо с антиоксидантным эффектом SkQ1. Также было отмечено, что С-ФЦ в концентрации 20 мкг/мл в присутствии прооксиданта более эффективно по сравнению с SkQ1 снижал уровень клеточной смерти дрожжевых клеток, что говорит о его сильном прямом антиоксидантном действии.

Литература

1. Li Y. The Bioactivities of Phycocyanobilin from Spirulina //Journal of Immunology Research. – 2022. – Т. 2022.
2. Li Y. J. et al. C-phycocyanin protects against low fertility by inhibiting reactive oxygen species in aging mice //Oncotarget. – 2016. – Т. 7. – №. 14. – С. 17393.
3. Goleva T. N. et al. SkQThy, a novel and promising mitochondria-targeted antioxidant //Mitochondrion. – 2019. – Т. 49. – С. 206-216.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕОБУЧАЕМОЙ РЕЗЕРВУАРНОЙ СПАЙКОВОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ЗАДАЧИ КЛАССИФИКАЦИИ

Д.Е. Куницын*, А.В. Серенко, А.Г. Сбоев

НИЦ Курчатовский Институт, selibrin@mail.ru

* Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Спайковые нейронные сети, обрабатывающие информацию в форме дискретных последовательностей импульсов-спайков, актуальны ввиду энергоэффективности их аппаратной реализации. Однако универсального эффективного способа обучения спайковых нейронных сетей пока не сформировалось, поэтому изучение методов решения классификационных задач машинного обучения с помощью спайковых сетей остаётся актуальным.

В работе изучается возможность использования слоя спайковых нейронов с фиксированными синаптическими весами на примере классификации ирисов Фишера. На все нейроны слоя поступают пуассоновские последовательности спайков со средними частотами, пропорциональными нормированным входным векторам. Веса входных синапсов нейронов задаются двумя способами: из равномерного распределения или из логистических функций [1]. Класс примера тестировочной выборки определяется агрегацией по нейронам вероятности принадлежности количества спайков, испущенных нейроном в ответ на этот пример, к распределению количеств спайков, испущенных этим нейроном в ответ на примеры этого класса из обучающей выборки. Агрегация вероятностей проводится как взвешенная сумма, веса в которой либо являются случайными числами от 0 до 1, в сумме дающими 1, либо задаются средними вероятностями принадлежности примеров обучающей выборки к правильному для них классу. При обоих способах задания синаптических весов и обоих способах задания весов декодирования точность классификации ирисов Фишера достигла 0.92–0.95 при 5-кратной кросс-валидации, что сравнимо с результатами других существующих в литературе однослойных спайковых нейронных сетей.

Литература.

1. A.Velichko, Neural network for low-memory iot devices and mnist image recognition using kernels based on logistic map, Electronics 9 (2020).

2. Sboev, A, Serenko, A, Rybka, R, Vlasov, D. Solving a classification task by spiking neural network with STDP based on rate and temporal input encoding. *Math Meth Appl Sci.* 2020; 43: 7802– 7814

МОДЕЛЬ ЭКСПРЕССИИ ГЕНА SOX2 НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ХИЛЛА

Е. В. Лаптенкова^{1,2}, П.М Готовцев^{1,2}

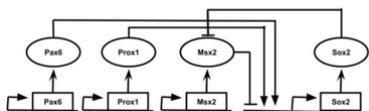
¹НИИ Курчатовский Институт, laptenkova.ev@phystech.edu

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

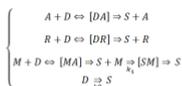
Функциональная версия гена Sox2 жизненно необходима для нормального развития млекопитающих, в частности, для самообновления нейрональных клеток. При этом его воздействие дозозависимо и нуждается в тонкой регуляции [1].

В ходе анализа механизмов регуляции активности гена Sox2 были выявлены действующие на данный ген транскрипционные факторы Pax6, Prox1 и Msx2, чьи уровни экспрессии в нейрональных клетках отличаются высокой корреляцией с уровнем экспрессии Sox2.

Также было обнаружено, что взаимная регуляция Msx2 и Sox2 образует петлю обратной связи на разных уровнях экспрессии [2,3].



Затем взаимодействия между генами были преобразованы в кинетическую зависимость, основанную на уравнении Хилла. Были найдены решения полученного уравнения



$$\frac{dS}{dt} = k_0[D] + k \frac{[A]^{n_A}}{(K_{DA})^{n_A} + [A]^{n_A}} + k \frac{[R]^{n_R}}{(K_{DR})^{n_R} + [R]^{n_R}} + k \frac{(K_{SM})^{n_M}}{(K_{SM})^{n_M} + [M]^{n_M}} - k_1[M][S]$$

для стационарного случая. В дальнейшем объединение разработанной модели с экспериментальными данными может позволить предсказать кинетические константы соответствующих белковых продуктов.

Литература.

1. Julian LM, et al. Opposing regulation of Sox2 by cell-cycle effectors E2f3a and E2f3b in neural stem cells. Cell Stem Cell. 2013 Apr 4;12(4):440-52. doi: 10.1016/j.stem.2013.02.001.
2. Wu, Q., et al. (2015) MSX2 mediates entry of human pluripotent stem cells into mesendoderm by simultaneously suppressing SOX2 and activating NODAL signaling. Cell Res. 25, 1314–1332
3. Lengler J., et al Agonistic and antagonistic action of AP2, Msx2, Pax6, Prox1 AND Six3 in the regulation of Sox2 expression. Ophthalmic Res. 2005 Nov-Dec;37(6):301-9. doi: 10.1159/000087774.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УСЛОВИЙ ЗАМОРОЗКИ НА СТРУКТУРУ ОРИЕНТИРОВАННЫХ ГУБЧАТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА

Д.А. Лелягина*, К.Г. Антипова, Н.А. Шарикова, С.Н. Малахов, Т.Е. Григорьев

НИЦ «Курчатовский институт», lelyagina.da@phystech.edu

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Естественный внеклеточный матрикс (ВКМ) – важный элемент биологических тканей, выполняющий в числе прочих структурную и регулятивную функции. Поскольку ВКМ характеризуется высокой пористостью, при создании его искусственных аналогов в тканевой инженерии используют различные биосовместимые 3D-высокопористые биоматериалы. Этим свойствам удовлетворяют губки, получаемые лиофильной сушкой замороженных полимерных растворов. В этом случае формирование пористой структуры происходит в процессе заморозки. Варьирование условий замораживания позволяет получать материалы с различной морфологией. Данная работа посвящена исследованию влияния условий заморозки полимерных растворов хитозана на структуру получаемых губчатых материалов.

В работе изучали губчатые матриксы с порами, ориентированными в заданном направлении. Для изготовления этих материалов использовали 1,5 масс.% раствор хитозана (Primex ChitoClear HQG 800, Mw = 600 кДа, Исландия) в 2 масс.% уксусной кислоте/H₂O. Готовый раствор фильтровали, дегазировали и распределяли в цилиндрические формы, состоящие из латунного дна и фторопластовой стенки. Такие формы обеспечивают температурный градиент в выделенном направлении. Образцы замораживали на медных стержнях, предварительно охлажденных в трех температурных условиях: -35°C, -70°C и -183°C. Все замороженные образцы лиофилизировали на установке Martin Christ Alpha-2SLC (США). Архитектуру полимерных матриксов изучали при помощи растрового электронного микроскопа (Phenom XL, ThermoFisher Scientific, США).

Полученные результаты показывают, что варьирование условий заморозки, приводит к значительному изменению в размерах, форме и организации пор. Это позволит широко использовать такие губчатые материалы в тканевой инженерии.

ПЕРЕХОДНАЯ МУЛЬТИМОДАЛЬНОСТЬ ПРИ ПЕРЕКЛЮЧЕНИИ МЕМРИСТОРА ИЗ НИЗКООМНОГО СОСТОЯНИЯ В ВЫСОКОМНОЕ

В.А. Лобанова, Д.О. Филатов, М.Н. Коряжкина, М.Е. Шенина,
И.Н. Антонов, О.Н. Горшков

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, valerishishmakova.8@gmail.com

Эффект переходной бимодальности наблюдается в различных физических, химических и пр. мультистабильных стохастических системах [1]. В [2] была обнаружена переходная бимодальность при переключении мемристора на основе $ZrO_2(Y)$ из состояния с низким сопротивлением (СНС) в состояние с высоким сопротивлением (СВС).

Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию кинетики переключения мемристора на основе структуры $Au(20 \text{ нм})/Ta(40 \text{ нм})/ZrO_2(Y)(20 \text{ нм})/Pt(20 \text{ нм})$ при наложении белого гауссова шума на прямоугольные переключающие импульсы напряжения.

Было обнаружено, что при определённых параметрах переключающих импульсов (амплитуда, длительность, интенсивность шума) переключение мемристора из СНС в СВС происходит через метастабильные промежуточные резистивные состояния (Рис. 1). Обнаруженный эффект интерпретирован как проявление у мемристора эффекта переходной мультимодальности, характерной для мультистабильной стохастической системы. Практическое значение обнаруженного эффекта заключается в возможности его использования для установления мемристора в наперёд заданное произвольное резистивное состояние, что имеет большое значение для применения мемристоров в нейроморфных вычислительных устройствах.

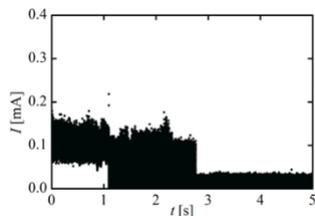


Рис. 1. Переходная характеристика мемристора при переключении из СНС в СВС

Работа выполнена в рамках гос. задания № FSWR-2022-0009.

Литература.

1. G. Broggi, et al., Phys. Rev. A, 1985, 32, 2803.
2. N.V. Agudov, et al., Chaos, Solitons & Fractals, 2021, 150, 111131.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ НАКОПЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ТАРГЕТНЫХ ОРГАНАХ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ

А.А. Анциферова^{1*}, М.А. Логинова^{2*}

^{1*} НИЦ «Курчатовский Институт», antsiferova.aa@mail.ru

^{2*} Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
физический факультет, кафедра оптики, спектроскопии и физики
наносистем, loginova.ma19@physics.msu.ru

Целями данной работы были разработка прогностической математической модели транспорта наночастиц во внутренних органах лабораторных мышей линии C57Bl/6 при длительном пероральном введении на основе ранее полученных экспериментальных данных, а также ее численное решение.

Математическая модель строилась на основе камерной модели, состоящей из шести камер: окружающая среда, желудочно-кишечный тракт, кровь, головной мозг, легкие, печень. Эксперименты доказывают значительное накопление наночастиц серебра именно в головном мозге и легких [1], а печень, желудочно-кишечный тракт и кровь, в силу анатомических и физиологических особенностей организма млекопитающего, неразрывно связаны с транспортом любого экзогенного вещества, вводимого перорально.

Составлена система кинетических дифференциальных уравнений для данной модели, в первом приближении коэффициенты положены постоянными. Написана программа, которая численно решает данную систему. С использованием экспериментальных данных и программы получены коэффициенты, при которых среднеквадратичное отклонение кривой от экспериментальных точек минимально. В результате получена искомая зависимость концентрации препарата во внутренних органах лабораторных мышей от времени, имеющая типичный вид фармакокинетической кривой. Были определены времена выхода графиков на плато и концентрация стабильного равновесия для каждого органа.

Литература.

1. Anna A. Antsiferova, Marina Yu. Kopaeva, Vyacheslav N. Kochkin, Pavel K. Kashkarov. Kinetics of Silver Accumulation in Tissues of Laboratory Mice after Long-Term Oral Administration of Silver Nanoparticles // *Nanomaterials* 2021, 11, 3204.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОДНЫХ СУСПЕНЗИЙ ПРОИЗВОДНЫХ ГРАФЕНА МЕТОДОМ УФ-СПЕКТРОСКОПИИ

В.В. Ломовкин, Д.Ю. Столярова, П.А. Вовкотруб, А.Ю. Вдовиченко,
С.Н. Чвалун

НИЦ Курчатовский Институт, lomovkin.vv@phystech.edu

Уже более десятилетия сохраняется активный интерес к исследованию оксида графена (ОГ) – графенового монослоя, покрытого кислородсодержащими группами – что обусловлено комбинацией его уникальных физико-химических свойств и широкими возможностями их контролируемого изменения. Управляя стереохимической структурой ОГ с помощью внешних воздействий можно задавать его оптические, электрофизические и реологические свойства для применения материала в электрохимических накопителях энергии, газочувствительных датчиках и биосенсорах.

Несмотря на достигнутые успехи в данном направлении, не решенным остается целый ряд научно-технологических задач, связанных как с разработкой новых методов модификации стереохимической структуры ОГ, так и развитием методологии контроля получаемого материала. В частности, дискуссионными остаются механизм оптического поглощения и применимость спектрофотометрического метода анализа концентрации водных суспензий ОГ при их термической обработке.

В настоящей работе были проведены спектрофотометрические исследования водных суспензий ОГ, термостатированных при 80 °С в течение 0-120 часов. Установлено, что термостатирование приводит к ранее не отмеченным в литературе изменениям спектра оптического поглощения ОГ. В то же время, показано, что оптическая плотность ОГ сохраняет линейную зависимость от концентрации материала, подтверждая применимость спектрофотометрического метода для анализа концентраций водных суспензий ОГ. Были экспериментально определены значения показателя поглощения для суспензий ОГ в концентрациях от 0.0005 до 0.0025 масс.% и проанализирована их зависимость от длительности термостатирования.

Выполнено при финансовой поддержке Госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА ЛИПИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ ЭФИРОВ АСТАКСАНТИНА С ДОБАВЛЕНИЕМ ПЛЮРОНИКА F68

Марченкова Н.С.*, Куликов Е.А., Лотош Н.Ю., Селищева А.А.

НИЦ «Курчатовский институт»

* РХТУ им. Д.И. Менделеева, marchenkova.nata@inbox.ru

Астаксантин АСТ (в том числе и его эфиры (эфАСТ)) – природный кетокаротиноид, который способен эффективно тушить активные формы кислорода и удалять свободные радикалы [1]. Несмотря на то что АСТ и эфАСТ обладают широким спектром биологической активности и способны проникать сквозь гематоэнцефалический барьер [2], их использование сильно ограничено в связи с малой растворимостью в воде.

Целью данной работы является оптимизация состава водорастворимых липидных наночастиц эфАСТ с добавлением трёхблочного сополимера «Плюроник F68».

Наночастицы с различной концентрацией плюроника от 0,1% до 4% и эфАСТ (0,5 мг/мл) готовились выпариванием хлороформа из водного раствора плюроника (см. табл.). Методом динамического рассеяния света были определены размеры частиц и индекс полидисперсности (PdI). Дзета потенциал наночастиц с плюроником составляет -41 ± 3 мВ. Наиболее стабильные частицы с маленьким размером образовывались с концентрацией плюроника 0,3%-1%.

Таблица. Составы и размеры приготовленных наночастиц.

№	Состав системы	Средний диаметр, нм	PdI
1	S75 2 мг/мл + эфАСТ 0,5 мг/мл + плюроник 0,1%	141±20	0,282
2	S75 2 мг/мл + эфАСТ 0,5 мг/мл + плюроник 0,3%	122±20 (43,9%) 615±200 (51,3%)	0,505
3	S75 2 мг/мл + эфАСТ 0,5 мг/мл + плюроник 0,5%	115±5 (13,6%) 900±50 (84,9%)	0,427
4	S75 2 мг/мл + эфАСТ 0,5 мг/мл + плюроник 1%	75±15 (36,6%) 450±150 (61,3%)	0,529
5	S75 2 мг/мл + эфАСТ 0,5 мг/мл + плюроник 2%	500±200	0,391
6	S75 2 мг/мл + эфАСТ 0,5 мг/мл + плюроник 4%	275±20	0,468

Работа выполнена при поддержке тематического плана НИЦ «Курчатовский институт» «Фундаментальные исследования в области биоэнергетики. 1.9ф.»

1. Du H.H. et al. J. Agric. Food Chem, 2015, Vol. 63, P. 9124–9130.
2. Galasso C. et al., Mar. Drugs, 2018, Vol. 16, № 8, P. 1–16.

ЭКСТРАКТЫ ИЗ ЛИШАЙНИКОВ КАК МОДИФИКАТОРЫ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ НОРМАЛЬНЫХ И ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК

М.В. Матвеенков

Государственное научное учреждение «Институт радиобиологии
Национальной академии наук Беларуси», matvey.matveenkov@mail.ru

Выявление ряда фотофизических и биологических свойств экстрактов из лишайников, позволяют рассматривать их как перспективный источник веществ, способных к модификации негативных эффектов избыточного воздействия ультрафиолетового излучения на клетки кожи человека [1, 2]. Немногочисленные работы указывают на возможный обратную активность данных веществ, заключающийся в усилении повреждающего действия ультрафиолета [3, 4]. Представляется важным оценить возможное проявление таких активностей у экстрактов из лишайников, произрастающих на территории Беларуси.

Работа посвящена количественной оценке фотомодифицирующих свойств экстрактов, выделенных из пяти видов лишайников в отношении линии клеток кератиноцитов человека НАСаТ и эпителиальной карциномы человека MCF-7.

Исследовали цитотоксическую активность экстрактов в отношении нормальных и опухолевых клеток. На основании кривых выживаемости выраженный эффект ($IC_{50} < 30$ мкг/мл) выявлен у одиннадцати экстрактов в отношении линии MCF-7 и десяти в отношении НАСаТ. Все экстракты проявили фотосенсибилизирующие свойства в отношении опухолевых клеток, вплоть до полного подавления жизнеспособности клеток субтоксичными дозами УФ. В отношении кератиноцитов экстракты проявили как фотосенсибилизирующую, так и фотозащитную активность.

Литература:

1. S. Takshak, S.B. Agrawal, J. of Photochemistry and Photobiology, 2019, Vol. 193, P. 51-88.
2. Radice M. et al., Fitoterapia, 2016, Vol. 114, P. 144–162.
3. Rojas J. L. et al., Pharmaceutical and Biosciences Journal, 2015, P. 18–26.
4. Boehm F. et al., Journal of Photochemistry and Photobiology, 2009, Vol. 95, № 1, P. 40-45.

ВЗАИМОСВЯЗЬ УРОВНЯ ИММУНОГЛОБУЛИНА G C
МОРФОМЕТРИЧЕСКИМИ НАРУШЕНИЯМИ МОЗГА ПРИ
МЯГКОМ КОГНИТИВНОМ СНИЖЕНИИ

И.К. Малашенкова, В.Д. Мельникова, С.А. Крынский, Д.П. Огурцов,
Н.А. Хайлов

НИЦ «Курчатовский институт», veronika_m00@mail.ru

Болезнь Альцгеймера (БА) – самая частая причина деменции у лиц старше 65 лет. Нередко развитию БА предшествует синдром мягкого когнитивного снижения (МСІ). Нами ранее показана взаимосвязь недостаточности гуморального иммунитета с прогрессированием когнитивных нарушений при синдроме МСІ [1]. Цель работы - оценка структурных изменений мозга при МСІ в зависимости от состояния гуморального иммунитета. Обследованы 48 пациентов с МСІ, 19 здоровых добровольцев. Показатели гуморального иммунитета определяли методом ИФА. Для структурной МРТ головного мозга использовали 1,5 Тл МР-томограф (Toshiba). Для оценки когнитивных функций использовали Монреальскую когнитивную шкалу (МОСА). Выявлено, что у пациентов с показателями МОСА <24 (в норме 30) и уровнем IgG <12,5 г/л (в среднем 10,49±0,67 г/л) отмечался ряд изменений мозга по сравнению с контролем: снижение объема серого вещества в области перешейка правой поясной извилины, средней толщины в области правой верхней теменной извилины. У больных с аналогичным низким уровнем МОСА 24 и ниже, но с нормальным и повышенным уровнем IgG (>12,5 г/л, в среднем 15,79±0,72 г/л) таких морфометрических изменений не было. Ассоциации IgG со структурными изменениями мозга подтверждают его значение в патогенезе нейродегенерации при МСІ и его потенциальную прогностическую роль.

Литература.

1. Малашенкова И.К., Крынский С.А., Хайлов Н.А., и соавт. Журнал неврологии и психиатрии им. С.С. Корсакова. 120 (10), 60–68 (2020).

ПРИМЕНЕНИЕ ДРОЖЖЕЙ АЭРОБНОГО ТИПА ОБМЕНА КАК МОДЕЛЬНОГО ОРГАНИЗМА ДЛЯ CRYO-CLEM МИКРОСКОПИИ

Мустафин Д.А.¹, Рогов А.Г.²

¹ Московский физико-технический институт, Долгопрудный,
mustafin.da@phystech.edu

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Москва, lloss@rambler.ru

Корреляционная свето-электронная микроскопия (CLEM) – комплексный метод визуализации биологических объектов, основанный на сочетании флуоресцентной и электронной микроскопии, дающей информацию об ультраструктуре объекта. Для получения информации об объектах в состоянии, наиболее приближенном к нативному, лучше всего подходят экспрессируемые *in situ* конструкции, содержащие гены электронно-плотного контрастного зонда и флуоресцентного белка.

Многие социально-значимые заболевания связаны с дисфункцией митохондрий и связанным с ней нарушением клеточного метаболизма. Применение cryo-CLEM является перспективной методикой для оценки изменений ультраструктуры митохондрий, поскольку существующие методы пробоподготовки могут существенно исказить данные.

Для исследования внутриклеточных консервативных процессов хорошо подходят дрожжевые модели, благодаря своей относительной простоте. Традиционные пекарские дрожжи *Saccharomyces cerevisiae* являются плохой моделью для изучения митохондрий, поэтому в работе использованы дрожжи аэробного типа обмена *Yarrowia lipolytica*, имеющие полноценную дыхательную цепь “животного типа” и в норме разветвленный митохондриальный ретикулум [1].

Методом клонирования Golden gate были получены мутанты, экспрессирующие генетическую конструкцию для CLEM в виде зеленого флуоресцентного белка, слитого с одной субъединицей ферритина, что при сборке накапливает ионы железа из среды инкубации и создает контраст для детекции электронным микроскопом.

Литература.

1. Epremyan K.K., Goleva T.N., Rogov A.G., Lavrushkina S.V., Zinovkin R.A., Zvyagilskaya R.A. *Microorganisms*, 2022, 10(9), 1817.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ КАРТ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ПЛЁНОК С УЧЁТОМ НАРУШЕНИЯ ГОРИЗОНТАЛЬНОГО ПОРЯДКА

Л.Р. Муфтахова

НИЦ Курчатовский Институт,
Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), кафедра нано, био, информационных
и когнитивных технологий, muftakhova.lr@phystech.edu

Ленгмюровские плёнки представляют собой двумерные упорядоченные молекулярные ансамбли на поверхности жидкости. Благодаря процессам самоорганизации, они формируют упорядоченную структуру, от которой зависят свойства функционального материала. Молекулы, составляющие плёнку, имеют нанометровый масштаб. Следовательно, дифракция рентгеновских лучей позволяет исследовать кристаллическую структуру плёнки. Для увеличения поверхностной чувствительности используется метод дифракции в скользящей геометрии[1]. По характерным дифракционным картинам можно определить параметры кристаллической структуры, геометрическую форму молекул, статистические параметры ориентаций молекул, размеры кристаллитов, степень разупорядоченности в системе[2-3].

В недавних экспериментах по малоугловой дифракции на плёнках арахидиновой кислоты мы наблюдали необычную картину: дифракционные пики искривлены, в то время как типичная дифракционная картина для двумерного ансамбля представляет собой вертикальные стержни. Одним из возможных объяснений возникновения искривлённых максимумов: нарушение горизонтального порядка в двумерном поликристалле. На основе этого предположения мы разработали теоретическую модель дифракции, которая позволяет численно воспроизвести искривления «хвостов» дифракционных пиков. Разработан алгоритм, позволяющий проводить численное моделирование двумерных картин дифракции в обратном пространстве с учётом искривления «хвостов».

Литература.

1. K. Kjær, Phys. B.: Condensed Matter, 198(1-3), 100-109 (1994).
2. V.M. Kaganer, et al., Reviews of Modern Physics, 71(3), 779 (1999).
3. M.A. Chuev, et al., Crystallography Reports, 65(5), 772-778 (2020).

ФИЛЬТРАЦИЯ СУБМИКРОННЫХ АЭРОЗОЛЕЙ ПРИ ПОВЫШЕННОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Е.В. Нестеренко, П.Ю. Макавеев

НИЦ Курчатовский Институт, nesterenkoelizaweta@yandex.ru

В докладе рассмотрено современное состояние высокоэффективной фильтрации субмикронных аэрозолей при высокой температуре. Подробно рассмотрено осаждение наночастиц в модельном фильтре с известным полем течения. Показано, что вследствие роста длины свободного пробега молекул воздуха при увеличении температуры возрастает коэффициент диффузии частиц, и, следовательно, эффективность их осаждения. Рассчитаны коэффициенты захвата наночастиц в зависимости от температуры для воздуха и гелия. [1]

В проведенных первых экспериментах при температуре до $T=500\text{K}$ при постоянном расходе наноаэрозолей молибдена было показано, что эффективность слабо возрастает, поскольку рост коэффициента захвата компенсируется уменьшением времени пребывания наночастиц около волокон из-за роста скорости течения. В качестве модельных фильтров использовались металлические сетки. Концентрация наночастиц до и за сетчатым фильтром определялась фотоэлектрическим счетчиком, после их укрупнения в пересыщенных парах малолетучей жидкости (дибутилфталат). Развитая методика измерений позволяет проводить исследования до более высоких температур.

Автор благодарит д.ф.-м.н. В.А. Кирша за обсуждение результатов.

Литература.

1. А.А. Kirsh, I.B. Stechkina Theory of Aerosol Filtration with Fibrous Filter / in: "Fundamentals of Aerosol Science" / ed. By D. T. Shaw., 1978, p. 165-256.

УСТАНОВКА ДЛЯ IN SITU МЕХАНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ В РЭМ

Т.Д. Пацаев, Е.В. Ястремский, А.Л. Васильев
НИЦ Курчатовский Институт, timpatsaev@mail.ru

Определение физико-механических свойств материалов – важная составляющая разработки изделий практически во всех сферах науки и техники. В частности, такие исследования необходимы при разработке полимерных матриц - основы для формирования искусственных органов и тканей, на которые высаживают культуры клеток [1].

Для проверки механических свойств материалов используются испытательные (в том числе разрывные) установки, которые предназначены для измерений зависимости напряжения в материале от деформации, что позволяет определить параметры упругости материала, исследовать процессы ползучести и релаксации, влияющие на его прочность и микроструктурные свойства [2, 3].

Была разработана и собрана установка для проведения механических испытаний *in situ* в камере растрового электронного микроскопа (РЭМ) с возможностью использования режима естественной среды (ЕРЭМ), который позволяет изучать различные биологические объекты, в частности клетки и ткани, а также любые непроводящие образцы без напыления дополнительных проводящих покрытий на их поверхность, таким образом сохраняя её естественную микроструктуру.

Конструктивные особенности установки позволяют использовать модульные зажимы для проведения испытаний образцов широкого диапазона форм и размеров. В процессе эксперимента возможно получение изображений поверхности образца с разрешением до 10 нм в режимах высокого вакуума и режиме естественной среды.

Литература

1. Teoh G. Z. et al., *Minerva medica*, 2015, V. 106, P. 17-33.
2. Har-Shai Y. et al., *Plastic and reconstructive surgery*, 1996, V. 98, N. 1, P. 59-70; discussion 71.
3. Ventre M., Mollica F., Netti P. A., *Journal of biomechanics*, 2009, V. 42, N. 4, P. 430-435.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ НА РОСТ И НАКОПЛЕНИЕ МЕТАБОЛИТОВ *CHLORELLA VULGARIS* ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ФОТОБИОРЕАКТОРА ВЕРТИКАЛЬНОГО ТИПА

М.Г. Петрова^{1,2}, К.В. Горин¹

¹ НИЦ Курчатовский Институт,

² Московский политехнический университет

Микроводоросли являются потенциальным источником биотоплива, а также ценных веществ, которые могут быть использованы в пищевой и фармацевтической промышленности. Кроме того, они сокращают содержание парниковых газов в атмосфере, фиксируя CO₂, и выделяют кислород [1].

В качестве объекта исследования был выбран штамм микроводоросли *Chlorella vulgaris* GKVI. Данная культура имеет ряд преимуществ: высокая фотосинтетическая эффективность, короткий цикл роста, соответственно, быстрый набор биомассы, высокое содержание белка и нейтральных липидов в клетках [2].

В искусственной среде фотобиореактора тщательно контролируются заданные условия, такие как освещённость, температура и газообмен. Изменяя их, можно влиять на рост биомассы и концентрацию веществ, которые синтезируют клетки в процессе жизнедеятельности [3].

В работе было проведено культивирование микроводоросли *Chlorella vulgaris* в барботажном плоскопанельном фотобиореакторе вертикального типа.

Исследовали влияние различной концентрации CO₂ на динамику роста, выход биомассы, качественный и количественный жирнокислотный состав, а также содержание белка.

Литература:

1. S. Shaw, J. Dent. Bio-City, Birmingham, United Kingdom. eVolo Architecture Magazine. 2009.
2. A. P. Carvalho, L.A. Meireles, F.X. Malcata, Biotechnol Prog, 2006, V. 22, №. 6, p. 1490-506.
3. M. Morweiser, O. Kruse, B. Hankamer, C. Posten, Developments and perspectives of photobioreactors for biofuel production, Applied Microbiology Biotechnology, 2010, V. 87(4), p. 1291—1301.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ АГРЕГАТОВ МОЛЕКУЛ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ МЕТОДОМ КРИОЭЛЕКТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

П.Р. Подлесный^{1,2}, Ю.М. Чесноков²

¹ Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), podlesnyi.pr@phystech.edu

² НИЦ Курчатовский Институт

В результате самоорганизации в водной среде молекул поверхностно-активных веществ (ПАВ) происходит образование агрегатов различной формы: сферических, цилиндрических мицелл, везикул [1]. Интерес к изучению таких систем обусловлен, в частности, тем, что растворы длинных цилиндрических мицелл широко применяются в качестве загустителей во многих областях промышленности: нефтедобывающей, косметической. Физические свойства раствора связаны с морфологией агрегатов молекул ПАВ [1].

Растворы ПАВ были витрифицированы и исследованы в криогенном электронном микроскопе Titan Krios. Удалось установить, что в зависимости от соотношения двух ПАВ агрегаты имеют форму длинных цилиндрических мицелл, целых или перфорированных везикул. При этом цилиндрические мицеллы формируют трехмерные сетки топологических зацеплений или разветвлений.

Для исследования трехмерной структуры агрегатов был применен метод криоэлектронной томографии. Алгоритм скелетизации и объемная корреляция с цилиндрическим шаблоном позволили построить трехмерные графы сетки агрегатов в программе Avizo. На основе полученных данных в дальнейшем предполагается осуществить более детальное изучение морфологии агрегатов: определить характерные размеры, построить трехмерные модели зацеплений и разветвлений.

Образцы предоставлены с.н.с. В.С. Молчановым – сотрудником научной группы проф. О.Е. Филипповой кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета МГУ.

Литература.

1. А.Л. Квятковский, В.С. Молчанов, О.Е. Филиппова, Высокомолекулярные соединения (серия А), 2019, Т. 61, № 2, стр. 180-192.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ БЕЛОГО СВЕТА НА РОСТ ЦИАНОБАКТЕРИИ *ARTHROSPIRA PLATENSIS* И ВЫХОД ФИКОЦИАНИНА

Р.Г. Василев¹, С.П. Пономарев², Я.Э. Сергеева^{1,3}, Д.В. Сухинов¹

¹ НИЦ Курчатовский Институт

² Московский Политехнический Университет (Московский Политех),
sofya.ponomar@gmail.com

³ Московский физико-технический институт (Национальный
исследовательский университет)

В последнее время растет коммерческий интерес к культивированию фототрофных микроорганизмов для получения фармацевтических препаратов, продуктов питания и биотоплив [1]. В частности, к *Arthrospira platensis* – цианобактерии, синтезирующей С-фикоцианин (С-ФЦ) [2]. Изменяя параметры культивирования, можно добиться увеличения содержания С-ФЦ в биомассе цианобактерий. Одним из факторов, влияющих на рост и накопление биомассы, а также содержание С-ФЦ в клетках, является освещенность и ее характеристики: спектральное распределение и интенсивность [3].

Цель работы – исследование влияния интенсивности белого света на рост цианобактерии *A. platensis* В-12619 и выход С-ФЦ (мг/л питательной среды). Культивирование проводили в двух вариантах: при освещении специальной люминесцентной лампой для фотосинтеза (1750±250 и 2150±150 люкс) и светодиодами SMD 2835 (1750±250 и 2750±250 люкс). На основании полученных результатов можно сделать вывод о том, что интенсивность освещения, независимо от типа использованного источника, не оказывала влияния на максимальную величину биомассы, при этом более высокая скорость роста была отмечена при большей из исследуемых интенсивностей. Тогда как на выход С-ФЦ влияли оба параметра и наибольший выход С-ФЦ (317,35±0,17 мг/л) был получен при использовании светодиодов SMD 2835 и интенсивности 1750±250 люкс.

Литература

1. М.А. Borowitzka, J. Appl. Phycol., 2013, 25, p. 743-756.
2. L. Jiang, et al., J. Cancer, 2017, 8, p. 3416-3429.
3. G.M. Lima, et al., Algal research, 2018, 31, p. 157-166.

ОРГАНИЧЕСКИЕ МЕМРИСТИВНЫЕ УСТРОЙСТВА НА ОСНОВЕ НАНОВОЛОКОН ПОЛИАНИЛИНА

Н.В. Прудников¹, М.В. Серенко^{1,2}, А.В. Емельянов^{1,2}, В.А. Демин¹

¹ НИЦ Курчатowskiй Институт, Prudnikov.nv@phystech.edu

² Московский Физико-Технический Институт (национальный
исследовательский университет)

Мемристоры – элементы цепи способные изменять и сохранять свое сопротивление при подаче определенных электрических импульсов [1]. Нейроморфные системы на основе мемристоров обеспечивают большую энергоэффективность по сравнению с традиционными вычислительными устройствами, а также позволяют реализовать биологически правдоподобные механизмы обучения [2]. Одним из современных подходов для распознавания временных рядов данных, а также значительного снижения размерности системы являются резервуарные системы на основе стохастических устройств [3].

В данной работе впервые продемонстрировано изготовление мемристивных устройств на основе нановолокон полианилина, синтезированных на границе раздела двух сред [4]. Устройства демонстрируют устойчивые резистивные переключения. Произведено сравнение устройств с различной относительной концентрацией суспензии нановолокон с детерминированным устройств на основе тонкой пленки полианилина.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 20–57–7801) с использованием оборудования ресурсных центров НИЦ «Курчатowskiй институт».

Литература.

1. Strukov D.B. et al. The missing memristor found // Nature. 2008. Vol. 453, № 7191. P. 80–83.
2. Nikiruy K.E. et al. Dopamine-like STDP modulation in nanocomposite memristors // AIP Advances. 2019. Vol. 9, № 6. P. 065116.
3. Milano G. et al. In materia reservoir computing with a fully memristive architecture based on self-organizing nanowire networks // Nat. Mater. 2021. Vol. 21. P. 195–202.
4. Huang J., Kaner R.B. A General Chemical Route to Polyaniline Nanofibers // J. Am. Chem. Soc. 2004. Vol. 126, № 3. P. 851–855.

ВЛИЯНИЕ ШУМА НА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ МЕМРИСТОРА НА ОСНОВЕ СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ИЗ НИЗКООМНОГО В ВЫСОКООМНОЕ СОСТОЯНИЕ

М.А. Рябова, Д.О. Филатов, М.Н. Коряжкина, М.Е. Шенина,
И.Н. Антонов, В.А. Лобанова, О.Н. Горшков

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, gmargo01@mail.ru

Мемристоры – твердотельные электронные устройства нового поколения, работающие на основе эффекта резистивного переключения (РП). Эффект РП заключается в обратимом бистабильном (или мультистабильном) изменении сопротивления слоя диэлектрика в структуре МДМ под действием приложенного электрического напряжения. Мемристоры рассматриваются как основа энергонезависимой памяти, а также электронных *синаптических* устройств [1]. Однако широкое применение мемристоров при создании электронных устройств сдерживается недостаточной стабильностью параметров РП, обусловленной стохастической природой РП. Одним из возможных способов решения этой проблемы может быть применение специального переключающего сигнала – импульса напряжения с добавлением шумовой составляющей [2].

В настоящей работе исследовано влияние гауссова шума, наложенного на прямоугольные переключающие импульсы напряжения, на изменение резистивных состояний мемристора на основе $ZrO_2(Y)$ при переключении из низкоомного в высокоомное состояние. Исследованы зависимости параметров РП (напряжение переключения, отношение токов в низкоомном и высокоомном состоянии I_{ON}/I_{OFF}) от параметров переключающих импульсов (амплитуда, длительность) и от интенсивности шума. Обнаружено уменьшение напряжения переключения мемристора и увеличение отношения I_{ON}/I_{OFF} с увеличением интенсивности шума. Показана возможность контролируемого установления сопротивления мемристора в промежуточные (между низкоомным и высокоомным) состояния путём варьирования интенсивности шума.

Результаты работы могут быть использованы для разработки инновационных протоколов управления резистивным состоянием мемристоров, в т.ч. – в нейроморфных электронных устройствах.

Работа выполнена в рамках гос. задания № FSWR-2022-0009.

Литература.

1. Y. Li, et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 2018, 10, p. 24598-24606.
2. A. Stotland, M. Di Ventra, Phys. Rev. E 85, 011116 (2012).

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИК РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕМРИСТОРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИАНИЛИНА

М.В. Серенко^{1,2}, Н.В. Прудников¹, А.В. Емельянов^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский Институт», serenko.mv@phystech.edu

² Московский Физико-Технический Институт (Национальный
исследовательский университет)

Мемристоры – элементы цепи, способные при протекании через них электрического заряда изменять и сохранять свое сопротивление в некотором диапазоне между высоко- и низкопроводящим состояниями [1]. Среди прочих выделяются устройства на основе органических материалов, демонстрирующие гибкость, низкую стоимость изготовления и биологическую совместимость материалов. Одними из перспективных мемристивных элементов являются устройства на основе полианилина, резистивное переключение (РП) которых происходит за счет окислительно-восстановительных реакций [2]. Несмотря на подробное изучение таких реакций в полианилине [3], измерений времени РП мемристивных устройств на его основе с достаточной точностью ранее не проводилось.

В данной работе для мемристивных устройств на основе полианилина были измерены вольт-амперные характеристики и кинетики переключения в высоко- и низкопроводящее состояния. Изучена зависимость характерного времени РП от количества слоев пленки полимера (толщины) и амплитуды напряжения. Измеренные времена переключения лежат в диапазоне десятков миллисекунд.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ (20–57–7801) с использованием оборудования ресурсных центров НИЦ «Курчатовский институт».

Литература.

1. Strukov D.B. et al. The missing memristor found // Nature. 2008. Vol. 453, № 7191. P. 80–83.
2. Prudnikov N.V. et al. Associative STDP-like learning of neuromorphic circuits based on polyaniline memristive microdevices // J. Phys. D: Appl. Phys. 2020. Vol. 53, № 41. P. 414001.
3. Lacroix J.C., Kanazawa K.K., Diaz A. Polyaniline: A Very Fast Electrochromic Material // J. Electrochem. Soc. 1989. Vol. 136, № 5. P. 1308–1313.

ВЛИЯНИЕ СЛОЯ Al_2O_3 НА ПАРАМЕТРЫ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕМРИСТОРОВ НА ОСНОВЕ $\text{ZrO}_2(\text{Y})$

Д.А. Серов, М.Е. Шенина, И.Н. Антонов, М.Н. Коряжкина,
А.В. Круглов, А.Н. Михайлов, О.Н. Горшков

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
serow.dim2015@yandex.ru

В последнее время ведутся активные исследования в области создания нового типа резистивной энергонезависимой (мемристорной) памяти и устройств на её основе. Такая память благодаря своим уникальным возможностям в ближайшее время может стать основой для создания нового типа вычислительной техники и устройств нейроморфных систем. Мемристоры обладают рядом преимуществ: высокая плотность ячеек, скорость работы, выносливость, малый размер [1]. Функционирование мемристоров основано на эффекте воспроизводимого резистивного переключения (РП) из низкоомного состояния в высокоомное и обратно. Однако их широкое практическое применение сдерживается существенной нестабильностью параметров РП. Одним из возможных способов решения этой проблемы может быть применение многослойных диэлектриков в качестве функционального слоя в структуре мемристора [2]. В данной работе исследованы характеристики мемристоров с двухслойным диэлектриком $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2(\text{Y})$. Изучено влияние толщины слоя Al_2O_3 на параметры РП. Al_2O_3 имеет сравнительно большую энергию образования вакансий кислорода и большую энергию барьера миграции, так что миграция вакансий в цикле РП будет затруднена. Кроме того, Al_2O_3 позволяет снизить вероятность образования новых вакансий в слое $\text{ZrO}_2(\text{Y})$ во время многократных циклов переключения, что обеспечит постоянное количество вакансий в структуре филамента и стабилизирует параметры мемристора [3]. Обнаружено, что введение слоя определенной толщины Al_2O_3 приводит к увеличению отношения токов в высокоомном и низкоомном состояниях, а также к уменьшению разброса значений токов и напряжений в процессе РП.

Работа выполнена в рамках гос. задания № FSWR-2022-0009.

Литература.

1. В. Mohammad, et al., Nanotechnol. Rev., 2016, 5, p. 311-329.
2. X.A. Tran, et al., IEEE Electron Device Lett., 2011, 32, p. 1290-1292.

3. M. Ismail, et al., *Nanoscale Res. Lett.*, 2022, 17, 61.

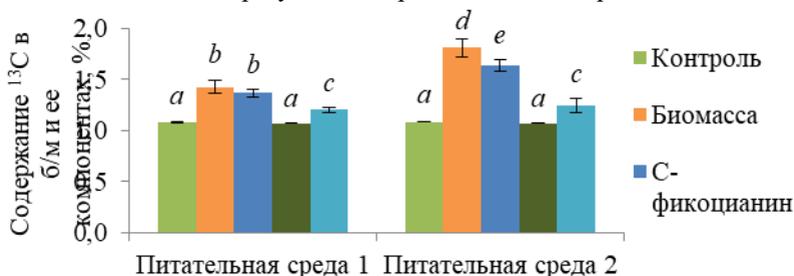
ИЗУЧЕНИЕ ПУТЕЙ НАКОПЛЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО УГЛЕРОДА ЦИАНОБАКТЕРИЕЙ *ARTHROSPIRA PLATENSIS*

Д.В. Сухинов¹, Я.Э. Сергеева^{1,2}

¹НИЦ Курчатовский институт, ²МФТИ (НИУ), sukhinov.dv@yandex.ru

Среди фототрофных микроорганизмов, микроводоросли и цианобактерии наиболее широко используются для производства биотоплив, полезных кормовых и пищевых биодобавок, веществ с высокой добавленной стоимостью, а также для решения экологических проблем, включая биосеквестрацию CO₂, а также в биорегенеративных системах жизнеобеспечения пилотируемых космических аппаратов. Повышенное внимание к данным микроорганизмам обусловлено высокими показателями эффективности фотосинтеза, содержания белка, липидов, скорости накопления биомассы и низкими требованиями к занимаемым при культивировании площадям, по сравнению с высшими растениями [1].

Цель данного исследования – изучение поглощения атмосферного CO₂ цианобактерией *A. platensis* В-12619, а также распределения поглощенного углерода по компонентам биомассы с использованием изотопа ¹³C. Культивирование проводили на двух вариантах питательных сред: стандартной (1) и с пониженным содержанием растворенного неорганического углерода (2). Далее проводили биохимический и изотопный анализы полученной биомассы. Основные результаты приведены на диаграмме:



Из диаграммы видно, что *A. platensis* накапливает углерод из атмосферного CO₂, неравномерно распределяя его по компонентам биомассы, несмотря на избыток углерода в питательной среде.

Литература.

1. Mapstone L.J. et al., *Biotechnol. Adv.* 2022. Vol. 59. P. 107946.

РЕЗИСТИВНЫЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ
ПОЛИ-ПАРА-КСИЛИЛЕНА С НАНОЧАСТИЦАМИ ОКСИДА
МОЛИБДЕНА

А.Д. Трофимов*, **А.Н. Мацукатова**, **А.А.
Миннеханов**, **А.В. Емельянов***

НИЦ Курчатовский Институт, filltrof@yandex.ru

*Московский физико-технический институт

Одной из перспективных разработок микроэлектроники являются устройства, основанные на резистивном переключении (РП) – мемристоры. Однако повсеместное внедрение данной технологии пока невозможно из-за некоторых проблем, таких как дороговизна производства, низкая воспроизводимость циклических РП, короткое время хранения резистивных состояний. Возможным материалом для производства мемристоров является поли-пара-ксилилен (РРХ) [1]. В данной работе были исследованы характеристики и механизм РП образцов на основе слоя РРХ с наночастицами оксида молибдена (PPX-MoO_{3-x}) и разными верхними электродами (медь, платина). Продемонстрирована структура со стабильными РП (рис 1а), с крайне низким разбросом напряжений переключения в низкоомное состояние (дисперсия менее 0.1 В) и с высокой пластичностью (рис 1б) (36 состояний). Установлено, что РП в данных мемристорах происходит по механизму электрохимической металлизации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №20-79-10185) на оборудовании ресурсных центров (НИЦ «Курчатовский институт»).

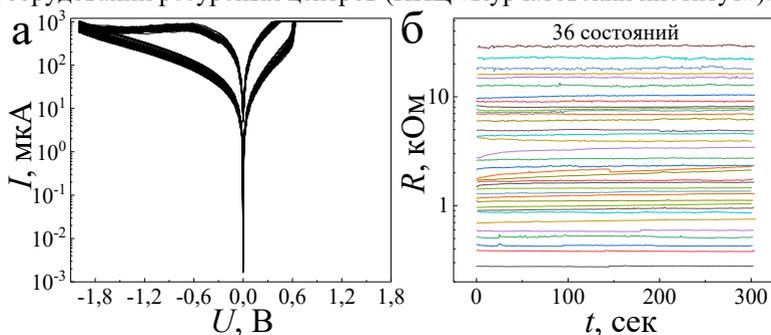


Рис 1. а – РП и б – пластичность мемристора на основе РРХ- MoO_{3-x}

Литература.

1. А.А. Minnekhanov, et al., Sci. Rep., 2019, 9:10800.

СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ АНАЛИЗА УГЛОВЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ КРИТИЧЕСКОГО ТОКА ВТСП ЛЕНТ

М.А. Федоров^{1,2}, В.В. Гурьев²

¹Московский авиационный институт (МАИ), maxhitmen@gmail.com

²НИЦ Курчатовский Институт

Для современной технической сверхпроводимости важной задачей является анализ зависимостей критического тока от угла ориентации образца ВТСП ленты в магнитном поле. Появление такой анизотропии связано с особенностями системы дефектов кристаллической решетки сверхпроводника, называемых центрами пиннинга, а также с направлением движения квантов магнитного потока (вихрей). Поэтому с одной стороны анализ угловых зависимостей может дать информацию о дефектной структуре ВТСП ленты, необходимую для развития технологии самих ВТСП лент. С другой стороны, при проектировании электротехнического устройства, очевидно необходимо учитывать реальную анизотропию токонесущей способности по отношению к направлению магнитного поля. Однако широко используемые методы обработки, в основном, не отражают физической картины взаимодействия вихрей и центров пиннинга, что затрудняет извлечение полезной информации из угловых зависимостей критического тока.

В данной работе проанализированы угловые зависимости экспериментальных ВТСП лент, полученных в НИЦ Курчатовский институт. Измерения проведены в среде жидкого азота (77К) и поле 1 Тл. Образцы измерений – экспериментальные образцы ReBCO, где Re представляет смесь редкоземельных элементов (Gd-Dy, Sm-Dy, Dy-Y, Eu-Y). Угловая зависимость снята с шагом в 5 градусов, с разворотом на полные на 360 градусов. На некоторых образцах был обнаружен дополнительный пик на 90 градусов (ориентация поля по нормали к ленте). Кроме того, некоторые пики демонстрируют выраженную асимметрию. Анализ угловых зависимостей проводился в рамках модели «вихревого пути» и «модели анизотропного пиннинга». Проведено сравнение точности описания экспериментальных данных с учетом количества подгоночных параметров. Обсуждаются физические основания и отличия использованных предпосылок при построении модели

ОЦЕНКА ВЗАИМОСВЯЗИ ПОЛИМОРФИЗМОВ ГЕНА IL10 И МОРФОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕНЕНИЙ МОЗГА ПРИ ШИЗОФРЕНИИ

И.К. Малашенкова, Е.А. Филиппова, С.А. Крынский, Д.П. Огурцов
НИЦ «Курчатовский институт», watson-kate.fil@yandex.ru

Шизофрения (ШЗ) — многофакторное психическое заболевание. Структурные и функциональные нарушения мозга при ШЗ могут прогрессировать, что связывают с нейровоспалением. Однонуклеотидные полиморфизмы (SNP) в генах, регулирующих иммунную систему, связаны с риском ШЗ, но их роль и влияние на морфометрические показатели мозга не изучены [1]. Цель работы — изучение влияния SNP IL10 на структурные изменения мозга при ШЗ. В исследование вошли 95 больных ШЗ, в группу контроля — 99 здоровых добровольцев. SNP в гене *IL10* (rs1800872 C-592A, rs1800871 C-819T) выявляли методом ПЦР. Для статистической обработки применяли критерий Стьюдента. В сравнении с группой контроля у гомозигот CC по SNP IL10 C-592A (аллель ассоциирован со снижением продукции IL10 клетками у пациентов) выявлено уменьшение толщины коры в покрышечной части нижней лобной извилины справа ($p < 0,05$). У гомозигот CC по SNP IL10 C-819T (аллель ассоциирован со снижением продукции IL10 клетками у пациентов) уменьшена толщина коры в покрышечной части нижней лобной извилины справа ($p < 0,01$), в прецентральной извилине справа ($p < 0,05$). Эти изменения могут быть ассоциированы с клиническими особенностями течения заболевания [2]. Таким образом, SNP в гене *IL10* может быть одной из причин нарушения противовоспалительной регуляции при ШЗ.

Литература.

1. Maes M, Plaimas K, Suratane A, et al., *Cells.*, 2021, 10(11):2929.
2. Hilleke E Hulshoff Pol, René S Kahn, *Shizophr Bull.*, 2008 Mar; 34(2):354-66.

СИНАПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕРИСТОРА НА ОСНОВЕ TiO_x

Д.А. Хахулин, Д.А. Дзюба, В.И. Авилов, В.А. Смирнов

Лаборатория нейрорэлектроники и мемристивных наноматериалов,
ИНЭП ЮФУ, dhahulin@sfnedu.ru

Ввиду значительного роста спроса на продукты, связанные с искусственным интеллектом [1], растёт интерес к нейроморфной электронике. Особый интерес представляет разработка компонентной базы для изготовления импульсных нейронных сетей «в железе» [2].

В данной работе обсуждается методология исследования синаптические свойства нейроморфного компонента и приводятся результаты тестов на потенциацию/депрессию, paired-pulse facilitation (PPF) (рисунок 1) и spiking time-dependent plasticity (STDP) на примере мемристивной структуры на основе TiO_x .

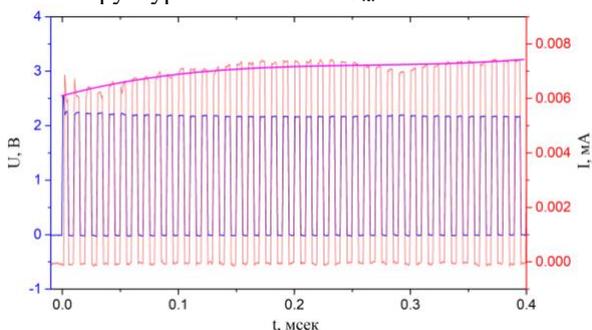


Рисунок 1 результат PPF теста мемристивной структуры на основе TiO_x

Работа выполнена за счет гранта Правительства Российской Федерации № 075-15-2022-1123 (изготовление образцов) и гранта Российского научного фонда № 22-79-10215 (проведение измерений)

Литература.

1. Дискуссия «Технологии искусственного интеллекта для обеспечения экономического роста» международной конференции Artificial Intelligence Journey 2022 : стенограмма. URL: <http://kremlin.ru/events/president/news/69927>. Дата публикации: 24.11.2022.

2. Yang R., Huang H. M., Guo X. Memristive synapses and neurons for bioinspired computing //Advanced Electronic Materials. – 2019. – T. 5. – №. 9. – C. 1900287.

МОДЕЛИРОВАНИЕ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА В ДРОЖЖАХ *YARROWIA LIPOLYTICA*

В.О. Хвастунов¹, А.Г. Рогов²

¹РХТУ им. Д.И. Менделеева, vadimkhvastunov@yandex.ru

²НИЦ Курчатовский Институт, lloss@rambler.ru

Болезнь Паркинсона (БП) – второе по встречаемости хроническое прогрессирующее заболевание головного мозга, в основе которого лежит дегенерация нигростриарных нейронов и возникающий в связи с этим дисбаланс нейромедиаторов [1]. α -синуклеин представляет собой пресинаптический нейрональный белок, который связан с развитием БП. Нерастворимые олигомерные агрегаты α -синуклеина являются токсичными, для клеточного гомеостаза. Поскольку БП является сложным многофакторным заболеванием, перспективной стратегией его исследования является постепенное упрощение моделей, в том числе использование дрожжевых моделей. В дрожжах работают консервативные молекулярные механизмы, характерные для всех эукариотических клеток [1]. Дисфункция и фрагментация митохондрий в нейронах человека является ранним фактором развития БП, поэтому мы предлагаем в качестве модели уникальные дрожжи аэробного типа обмена *Yarrowia lipolytica*, имеющие функциональные высокоструктурированные митохондрии, что позволяет изучать их морфологию при взаимодействии с α -синуклеином. Вдобавок, дыхательная цепь митохондрий дрожжей *Y.lipolytica* идентична таковой у млекопитающих [2], что позволяет моделировать биоэнергетические процессы и влияние на них α -синуклеина.

В работе методом клонирования Golden Gate был создан пул генетических конструкций для экспрессии в дрожжах *Y. lipolytica*, несущих разные вариации гена α -синуклеина, слитого с флуоресцентным белком, которые помогут пролить свет на роль митохондрий в патогенезе БП.

Литература.

1. Dauer W., Przedborski S., Neuron, 2003, 39(6), 889-909.
2. Epremyan K.K., Goleva T.N., Rogov A.G., Lavrushkina S.V., Zinovkin R.A., Zvyagilskaya R.A. The First *Yarrowia lipolytica* Yeast Models Expressing Hepatitis B Virus X Protein: Changes in Mitochondrial Morphology and Functions. Microorganisms, 2022, 10(9), 1817.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРОВ И КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА СВОЙСТВА СКАФФОЛДОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ 3D-ПЕЧАТИ

Князев Н.В.^{1,2}, Крашенинников С.В.¹, Крупнин А.Е.¹, Седуш Н.Г.¹,
Хмелевский А.А.^{1,2}

¹НИЦ «Курчатowski институт» khmelevskii.aa@phystech.edu

²Национальный исследовательский университет «МФТИ»

Пористые каркасы-скаффолды на основе биоразлагаемых полимерных материалов находят широкое применение в регенеративной медицине. Использование топологии на основе гироидной поверхности позволяет гибко варьировать пористость, механические свойства и сроки деградации конечного изделия, повысить остеоиндуктивные свойства [1] [2]. Использование в качестве материала полилактида (PLA), поликапролактона (PCL) и гидроксиапатита (HA) может стать оптимальным решением при создании скаффолдов с заданными требованиями.

Данное исследование направлено на отработку режимов экструзионной 3D-печати композиционными материалами на основе PLA/PCL/HA, а также изготовление и исследование механических свойств пористых каркасов-скаффолдов на основе гироидной поверхности.

Авторы благодарят ресурсные центры «Оптика» и «Полимер» ОРЦ ККНИБКС-ПТ. Исследование выполнено при финансовой поддержке Госадания НИЦ «Курчатowski институт».

Литература

1. Alizadeh-Osgouei M. et al. Smart Materials in Medicine. 2021. V. 2. P. 15.
2. Zhang, B., Wang, L., Song, P., Pei, X., Sun, H., Wu, L., ... Zhang, X. (2021). 3D printed bone tissue regenerative PLA/HA scaffolds with comprehensive performance optimizations. Materials & Design, 201, 109490. doi:10.1016/j.matdes.2021.109490

РАСЧЕТ ВЛИЯНИЯ ИЗОТОПИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ НА ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ 2H-SiC ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Д.А. Чернодубов, А.В. Инюшкин

НИЦ Курчатовский Институт, Chernodubov_DA@nrcki.ru

Карбид кремния – широкозонный полупроводник, обладающий высоким значением теплопроводности k . Он является перспективным материалом для силовой и высокочастотной электроники [1]. Наиболее часто исследуются кубический (3C-SiC) и гексагональные (2H-, 4H- и 6H-SiC) политипы. Для этих материалов был проведен ряд экспериментальных и расчетных исследований теплопроводности, но влияние на нее изотопического эффекта пока не изучено досконально [2].

Поскольку кремний имеет три стабильных изотопа (для природного состава содержание изотопов составляет 92.22% ^{28}Si , 4.69% ^{29}Si и 3.09% ^{30}Si), а углерод – два (98.93% ^{12}C и 1.07% ^{13}C), в кристаллах карбида кремния возникает рассеяние фононов на изотопах. Даже такие относительно небольшие доли изотопов оказывают значительное влияние на величину теплопроводности. Так, в кристаллическом кремнии изотопы ^{29}Si и ^{30}Si уменьшают величину теплопроводности на 8% [3].

В настоящей работе выполнен расчет температурной зависимости теплопроводности $k(T)$ 2H-SiC в базальной плоскости и перпендикулярно ей в диапазоне температур 100–500 К. Рассчитано влияние изотопического состава по кремнию и углероду на величину теплопроводности. Получено, что изотопическое обогащение 2H-SiC по изотопу ^{28}Si приводит к увеличению величины теплопроводности более чем на 10% при комнатной температуре.

Литература.

1. Rabkowski J., Pefititsis D., Nee H. P. // IEEE Ind. Electron. Mag. 2012. V. 6. №. 2. P. 17-26.
2. Protik N. H. et al. // Mater. Today Phys. 2017. V. 1. P. 31-38.
3. Inyushkin A. V. et al. // J. Appl. Phys. 2018. V. 123. №. 9. P. 095112.

КУЛЬТИВИРОВАНИЕ МИКРОВОДОРОСЛИ *SCENEDESMUS OBLIQUUS* НА КОМБИНИРОВАННЫХ СРЕДАХ С ЦЕЛЬЮ УДАЛЕНИЯ АЗОТА И ФОСФОРА

А.А. Шестакова^{1,2}, К.В. Горин¹

¹ НИЦ Курчатовский Институт, gkvbio@gmail.com

² Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина, sashshestakova62@gmail.com

В весенний период образуется большое количество сточных вод, содержащих различные антиобледелительные реагенты. Попадая в естественные водоёмы, такие воды могут вызывать эвтрофикацию. В связи с этим значительный научный интерес вызывают исследования, направленные на использование поверхностных сточных вод для культивирования фототрофных микроорганизмов с целью поглощения азота и фосфора.

Использование поверхностных сточных вод позволяет сократить затраты на культивирование из-за их высокой доступности и наличия в составе необходимых для роста питательных веществ, в том числе нитратов, фосфатов, аммиака, мочевины, а также металлов [1].

Большая часть потребляемой пресной воды превращается в сточные воды, содержащие высокие концентрации азота и фосфора. Поэтому так важно искать новые методы для доочистки сточных вод [2].

В качестве объекта исследования был выбран штамм культуры *Scenedesmus obliquus* ССАР 276/3А, полученный из коллекции водорослей и простейших (ССАР, Великобритания). Микроводоросли рода *Scenedesmus* активно исследуются на способность удаления азота и фосфора из сточных вод.

В работе представлены данные по культивированию микроводоросли *Scenedesmus obliquus* на комбинированных средах (среды с различными соотношениями питательной среды и поверхностных сточных вод) и снижению концентраций общего азота и фосфора в культуральных средах.

Литература.

1. Das D. Algal Biorefinery: An Integrated Approach // Springer International Publishing – 2015. – 467 p.
2. Abdel-Raouf N., Al-Homaidan A.A., Ibraheem I.B.M. Microalgae and wastewater treatment // Saudi Journal of Biological Sciences. – 2012. – Vol. 19, №3. – P. 257–275.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ И ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА
ЭКСПРЕССИИ БЕЛКОВ СЕМЕЙСТВА HIF В ПОКРОВЫХ
ЭМБРИОНА *M. MUSCULUS* НА СТАДИЯХ РАЗВИТИЯ E7-E9

П.М. Юсина

НИЦ Курчатовский институт, yusina.polina@mail.ru
*МГУ им. М.В.Ломоносова, биологический факультет

Изучение функционирования кожных покровов на разных этапах онтогенеза, включая ранние стадии эмбрионального развития, имеет большое фундаментальное и прикладное значение. Регуляторный комплекс HIF1 (гетеродимер белков HIF1 α и ARNT) играет важную роль в контроле клеточного ответа на гипоксию во многих тканях организма, в том числе и в коже. [1]. Так ли это и на эмбриональных стадиях развития – не известно, поскольку исследование каскада HIF1 в коже при эмбриогенезе объективно затруднено.

Мы предполагаем, что активность каскада HIF1 влияет не только на адаптивный ответ к условиям недостатка кислорода, но и на детерминацию кожного эпителия на ранних стадиях эмбриогенеза. Этот процесс сложно изучать, поскольку при нокауте по HIF у эмбрионов нарушается развитие плаценты, они погибают на стадии E10 [2].

Целью данной работы был анализ паттерна экспрессии белков каскада HIF на ранних этапах развития эмбриональных покровов мышцы. Для этого методом иммуофлуоресцентного окрашивания на стадиях E7, E8 и E9 эмбриогенеза мышей дикого типа была проведена оценка экспрессии белков HIF-каскада (HIF1 α и ARNT), белка p63, а также маркеров эпидермиса (Krt8, Krt14). Было показано, что белок HIF1 α присутствует в ядрах (т.е. в активированном состоянии) многих клеток покровной эктодермы уже на стадии E7.5, предшествуя экспрессии p63. Белок ARNT появляется в эпидермисе на более поздней стадии эмбрионального развития (E8.5-E9.5). Белок p63 детектируется на стадии E9,5. Таким образом, полученные результаты не противоречат нашей гипотезе об участии HIF1 α в процессе детерминации эмбрионального эпидермиса. Кроме того, отсутствие ARNT при активном HIF1 α на ранних стадиях развития указывает, что HIF1 α может функционировать независимо и вне рамок канонического гипоксийного пути.

Литература.

1. Semenza G.L. O₂ sensing: only skin deep? Cell, 2008.
2. Iyer N.V. et al. Cellular and developmental control of O₂ homeostasis by hypoxia-inducible factor 1 alpha. Genes Dev. 1998.

Секция 2.
Исследовательская инфраструктура
мегасайенс: синхротронные и
нейтронные источники

СИСТЕМА ЮСТИРОВКИ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ ОНДУЛЯТОРОВ ДЛЯ СИНХРОТРОНА «СИЛА»

Я.М. Абакумов

НИЦ Курчатовский Институт, Abakumov_YM@nrcki.ru

Ондуляторы - это вставные устройства, представляющие из себя магнитную сборку Хальбаха и служащие для генерации синхротронного излучения. Стабильность свойств и качество получаемого излучения зависят от точности расположения магнитов в сборке, которая достигается путём юстировки каждого магнитного элемента [1].

В докладе сообщается об основных требованиях, предъявляемых к точности выставления отдельных магнитных элементов ондуляторов проекта “СИЛА”. Рассмотрены способы предварительного вычисления и оптимизации размеров магнитных и концевых элементов, а также необходимой точности их позиционирования по положению и углу для ондулятора с периодом 27 мм гибридного и стандартного типов, основанные на теоретических расчетах и моделировании в программах Radia и Ansys Maxwell. Объяснены основные параметры, на основе которых производится подбор, а именно: первая и вторая интегральные ошибки, а также фазовая ошибка (RMS phase error) [2].

В докладе обсуждаются существующие способы активного и пассивного исправления данных ошибок. Отдельное внимание уделяется существующим аналогам системы юстировки магнитных элементов ондулятора, а также предлагается вариант автоматической реализации юстировки, основанной на деформации гибких элементов и происходящий при помощи робота-юстировщика. Рассмотрены различные варианты гибких элементов, а также методика полуавтоматического подбора их геометрических параметров.

В заключение, доклад рассматривает преимущества и недостатки каждой системы юстировки, а также подчеркивает важность проектирования первых опытных макетов ондуляторов.

Литература.

1. Onuki, H., & Elleaume, P. (Eds.). (2002). Undulators, Wigglers and Their Applications (1st ed.). CRC Press.: 166-168.
2. Charles Kitegi. Development of a cryogenic permanent magnet undulator at the ESRF. High Energy Physics - Experiment [hep-ex]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2008: 28-57.

XAS И WAVELET АНАЛИЗ БИЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ

С.В. Абросимов

НИИЦ Курчатовский Институт, sergeyabrosimoov@gmail.com
Международный исследовательский институт интеллектуальных
материалов ЮФУ

Применение методов машинного обучения для анализа спектров поглощения рентгеновских лучей является приоритетной задачей в материаловедении [1]. Этот метод анализа позволяет получать информацию о структуре материалов более точно и быстрее, чем численные методы. В своей работе я использовал методы машинного обучения, чтобы получить соответствие структурных параметров биядерных молекул с спектром XAS. Адаптивная выборка использовалась для улучшения качества аппроксимации функции XANES по структурным параметрам. В связи с доступностью рентгеноструктурных данных была проведена валидация результатов. Я применил машинное обучение для определения локальной атомной структуры моноядерных и дваядерных молекул, используя значение R-фактора для каждой деформации [2].

Для гетерогенных образцов металлоорганических каркасных структур было применено вейвлет преобразование для идентификации пар медь-медь во 2-й координационной сфере [3], [4].

Литература.

1. А.В. Солдатов - От спектроскопии EXAFS к спектроскопии XANES: новые возможности исследования материи.
2. A. Martinia, S. A. Gudab - PyFitit: The Software for quantitative analysis of XANES spectra using machine-learning algorithm.
3. Andrea Martini, Iliia A. Pankin, Anna Marsicano, Kirill A. Lomachenko, Elisa Borfecchia - Wavelet analysis of a Cu-oxo zeolite EXAFS simulated spectrum.
4. Iliia A. Pankin, Andrea Martini, Kirill A. Lomachenko, Alexander V. Soldatov, Silvia Bordig, Elisa Borfecchia - Identifying Cu-oxo species in Cu-zeolites by XAS: A theoretical survey by DFT-assisted XANES simulation and EXAFS wavelet transform.

ПРИМЕНЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СТЕКОЛ ЛЕГИРОВАННЫХ ЕВРОПИЕМ В ДАТЧИКАХ ИСКРОВОГО ПРОБОЯ

Л.В. Азина, В.А. Спиридонов, Д.А. Калганов, Д.Ю. Панов
Университет ИТМО, lvazina@itmo.ru

Люминесцентные материалы на основе ионов редкоземельных металлов широко используются в телекоммуникации, биовизуализации и охранно-пожарных системах.

В докладе представлены результаты разработки активного элемента датчика искрового пробоя на основе люминесцентного материала с ионами-активаторами европия в матрице из литий-бор-фосфатного стекла. Исследуемый материал получали методом высокотемпературной ($T = 1350\text{ }^{\circ}\text{C}$) плавки шихты в тигле в лабораторных условиях с использованием нитрата европия $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$. Выбор европия обусловлен максимумом возбуждения люминесценции в области ультрафиолетового излучения искрового пробоя и наибольшим квантовым выходом среди распространенных редкоземельных ионов-активаторов ($\Phi_{\text{Eu}} = 0.6$, $\Phi_{\text{Yb}} = 0.5$, $\Phi_{\text{Sm}} = 0.3$) [1]. Используемое в качестве матрицы стекло прозрачно в диапазоне длин волн $400\div 1000\text{ нм}$.

Разработанный материал позволяет эффективно преобразовывать оптическое излучение с длинами волн в области ультрафиолета $\lambda_{\text{п}} = 200\div 300\text{ нм}$ в видимое $\lambda_{\text{лм}} = 630\div 680\text{ нм}$. за счёт большого квантового выхода $\eta = 0.6$. С использованием образцов полученного люминесцентного стекла изготовлен прототип датчика искрового пробоя, отличающийся от аналогов большей надёжностью чувствительного элемента и устойчивостью к помехам в видимом и инфракрасном диапазоне оптического излучения.

Литература.

1. M. Norkus, et al., J. Non. Cryst. Solids. 569, 120966 (2021).

ЛАБОРАТОРНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ТЕСТИРОВАНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ И ПОДГОТОВКИ К СИНХРОТРОННЫМ ИССЛЕДОВАНИЯМ

А.А. Баранников, А.А. Снигирев

Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта,
abarannikov1@kantiana.ru

Современные источники синхротронного излучения предоставляют исключительные возможности в исследовании окружающего мира. Однако их использование сопровождается рядом трудностей, связанных с высокой конкуренцией за «экспериментальное время». Это затрудняет тестирование новой рентгеновской оптики и экспериментальных методов.

Альтернативным решением, позволяющим частично решать данную проблему, является использование современного лабораторного оборудования. В настоящей работе представлен лабораторный комплекс, разработанный для тестирования рентгеновской оптики и подготовки к синхротронным исследованиям [1,2]. Данный комплекс позволяет значительно сократить время синхротронного эксперимента, а также повысить его качество, принимая на себя ряд задач, не требующих высокого временного и энергетического разрешения.

В состав комплекса входят микрофокусный рентгеновский источник Excillum с жидким анодом, две моторизованные системы позиционирования оптических элементов и набор детектирующих устройств. Данное оборудование дает возможность реализовать широкий спектр экспериментальных методов, куда входят проекционная микроскопия и микроскопия с использованием преломляющих линз, микрорадианная рентгеновская дифракция, а также рентгеновская томография и топография.

Литература.

1. Barannikov A. et al. Laboratory complex for the tests of the X-ray optics and coherence-related techniques // EUV and X-ray Optics, Sources, and Instrumentation. – SPIE, 2021. – Т. 11776. – С. 50-60.
2. Shevyrtalov S. et al. Towards high-quality nitrogen-doped diamond single crystals for X-ray optics // Journal of synchrotron radiation. – 2021. – Т. 28. – №. 1. – С. 104-110.

КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ТИТАНА С КРАУН-ЭФИРАМИ КАК КОМПОНЕНТЫ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ОЛЕФИНОВ

А.О. Вихров^{1,2}, С.Ч. Гагиева¹, К.Ф. Магомедов¹

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

² Московский физико-технический институт, vihrov00@list.ru

Получены каталитические системы, состоящие из ионных гомо- и гетерометаллических комплексов титана и щелочных металлов и Al/Mg активаторов. Синтез катионных комплексов титана +3 осуществлен либо в результате восстановления молекулярных соединений титана +4 в присутствии сильных оснований Льюиса с последующим комплексообразованием, либо при прямом взаимодействием комплексов солей титана +3 с подходящим лигандом и предшественником аниона (в нашем случае – с $AlCl_3$). Катионный комплекс состава $[TiCl_2 \cdot 15-Crown-5]^+[AlCl_4]^-$ был получен обоими методами: восстановлением $TiCl_4$ диэтилалюминийхлоридом (Et_2AlCl) в присутствии краун-эфира и взаимодействием комплекса $TiCl_3 \cdot 3TGF$ с 15-краун-5 и безводным $AlCl_3$. Неожиданным в рассматриваемом случае является состав аниона: вместо ожидаемых $[TiCl_4]^-$ или $[TiCl_6]^{2-}$ комплекс кристаллизуется с тетраэдрическим анионом $[AlCl_4]^-$, который, видимо, образуется в качестве побочного продукта в ходе реакции восстановления Ti^{+4}/Ti^{+3} . Также для выяснения более полной картины каталитических свойств подобных соединений путем предварительного восстановления $TiCl_4 \cdot 2TGF$ диэтилалюминийхлоридом или этилалюминийдихлоридом в толуоле в присутствии 15-краун-5 и при различных соотношениях реагентов был получен ряд смесей, содержащих избыточное количество алюминийорганики. Для этой же цели нами синтезированы ионные комплексы хлорида титана 3+ с диметоксиэтаном состава $[TiCl_2 \cdot 2DME]^+[TiCl_4 \cdot DME]^-$.

Ионные комплексы состава $[M \cdot Crown]^+[TiCl_5]^-$, где M - Li, Na, K; Crown - дибензо-18-краун-6, бензо-15-краун-5, дибензо-24-краун-8, были синтезированы взаимодействием хлорида щелочного металла, тетрахлорида титана и краун-эфира в безводном толуоле. Продукты реакций представляют собой высокодисперсные рентгеноаморфные порошки, состав которых определен методами элементного анализа, ЯМР и МАЛДИ масс-спектрометрии. Проведение этих же синтезов в среде безводного ацетонитрила

позволило получить сольватированные комплексы в кристаллическом состоянии и определить их структуру методом РСА. При длительной выдержке реакционной смеси, содержащей дибензо-18-краун-6, хлорид калия и тетрахлорид титана, получен комплекс состава $[4 \text{ Crown } K_4(TiCl_6)]^{2+} [Cl_4TiOTiCl_4 \cdot 2CH_3CN]^{2-}$, строение которого также установлено методом РСА.

Изучение каталитической активности синтезированных соединений проводилось на модельной реакции полимеризации этилена в условиях, способствующих получению полимера с низкой степенью переплетения макромолекул. Активности комплексов титана с краун-эфирами, варьирующиеся в диапазоне 1920 – 4650 кг/моль час атм., существенно превышают активность диметоксизтанового комплекса, что подтверждает наше предположение о способности макроциклических лигандов – краун-эфиров эффективно стабилизировать каталитически активные частицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-23-00699. ЯМР анализ соединений проводили в рамках Программы развития Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета "Будущее планеты и глобальные изменения окружающей среды".

ФЕНОКСИАМИННЫЕ КОМПЛЕКСЫ ТИТАНА (4+) С ФЕНОКСИЭФИРНЫМИ И ТИОФЕНОКСИЭФИРНЫМИ ЛИГАНДАМИ - КАТАЛИЗАТОРЫ СИНТЕЗА СВМПЭ

С.К. Вишнякова, С.Ч. Гагиева*, К.Ф. Магомедов*, В.А. Тускаев*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
syaba3389@gmail.com

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова

Комплексы переходных металлов 4 группы с феноксииминными лигандами (FI-комплексы) являются, пожалуй, одной из самых удачных групп пост-металлоценовых катализаторов. Эти соединения катализируют полимеризации практически всех значимых олефиновых мономеров, характеризуются высокой эффективностью и позволяют получать уникальные по своим свойствам полимеры. Нами синтезирована серия моноанионных лигандов OO и OS-типов (схема 1), характеризующихся определенным структурным сходством с классическими феноксииминными лигандами. Взаимодействием этих лигандов с $TiCl_2(OiPr)_2$ или $Ti(OiPr)_4$ получены титановые комплексы $LTiY_2$, также схожие по структуре с фенокси-иминными катализаторами. В присутствии доступных Al/Mg активаторов состава $Et_nAlCl_{3-n}+Bu_2Mg$ комплексы катализируют полимеризацию этилена с образованием СВМПЭ.

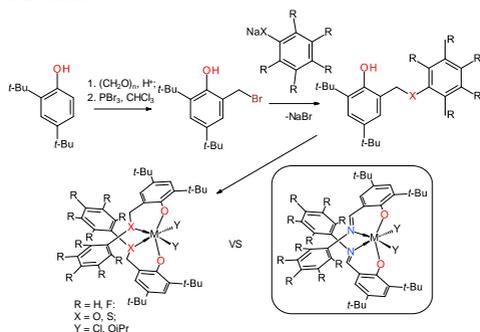


Схема 1. Синтез моноанионных лигандов OO и OS-типов

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-23-00578. ЯМР анализ соединений проводили в рамках Программы развития Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета "Будущее планеты и глобальные изменения окружающей среды".

2-АРИЛИДЕНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАЗОЛО[3,2- А]ПИРИМИДИНОВ – ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ АГЕНТЫ

Э.Р. Габитова^{1,2}, А.С. Агарков¹, А.А. Нефедова¹, И.А. Литвинов¹,
Д.Р. Исламов¹, А.С. Овсянников¹, В.А. Лазаренко³, П.В.
Дороватовский³, С.Е. Соловьева¹, И.С. Антипин²

¹ Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ
Казанский научный центр РАН, elina81100@gmail.com

² Казанский (Приволжский) федеральный университет

³ Национальный Исследовательский центр «Курчатовский институт»

В настоящее время актуальной остаётся проблема поиска новых противоопухолевых препаратов, способных сочетать в себе высокую эффективность, специфичность и низкую токсичность по отношению к здоровым клеткам. В этой связи производные тиазоло[3,2-*a*]пиримидина являются привлекательными объектами для исследования [1,2]. Данная работа посвящена синтезу, изучению структуры и противоопухолевой активности производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, содержащих 2-арилметиленовые группы (Схема 1).

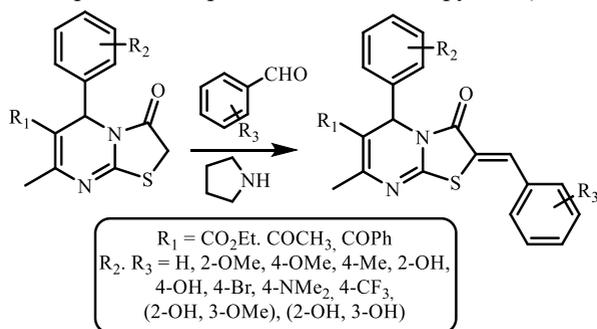


Схема 1. Синтез 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина.

Литература.

1. El-Shahat, M., Salama, M., et al. Mini-Rev. Med. Chem., 2021, 21(1), 118-131.
2. Nagaraju, P., Reddy, P. N., et al. Lett. Org. Chem., 2020, 17(12), 951-958.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-73-
10139.

ВНЕДРЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ МИКРОФЛЮИДНОГО СИНТЕЗА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СТРУКТУРЫ $BaGdF_5$

**З.М. Гаджимагомедова, В.А. Поляков, И.А. Панкин, Д.Ю.
Кирсанова, А.В. Солдатов**

Международный исследовательский институт интеллектуальных
материалов ЮФУ, zgad@sfnedu.ru

Рентгеновская фотодинамическая терапия (РФДТ) — это относительно новый подход к лечению злокачественных новообразований. Наноконпозиты для РФДТ обычно состоят из двух компонентов: нанолуминофора, активируемого рентгеновским излучением, и фотосенсибилизатора, принимающего преобразованную нанолуминофором энергию в УФ-видимом диапазоне [1-4]. Подбор оптимальных люминесцентных характеристик, биосовместимых покрытий, а также фотосенсибилизатора занимает много времени и требует затрат дорогостоящих компонентов. Для быстрого и более эффективного получения наноконпозитов были внедрены технологии микрофлюидного синтеза. Ранее разработанный новый микроволновый синтез нанолуминофоров позволил получить несколько серий наночастиц на основе структуры $BaGdF_5$ [5-7]. В данном исследовании методика синтеза была модернизирована внедрением микрофлюидных технологий. Таким образом, удалось получить серию нанолуминофоров $BaGdF_5:x\%Eu$ и $BaGdF_5:y\%Tb$ с различной концентрацией легирующего компонента для более детального изучения люминесцентных свойств наночастиц. Более того, микрофлюидные установки также использовались для синтеза наноконпозита $BaGdF_5:25\%Tb@Rb$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-15-00305-П).

Литература.

1. D. Yang, et. al., *Biomaterials*, 2014, p. 2011-2023.
2. H. Li, et. al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, p. 21518-21526
3. G.M. Gadzhimagomedova, et al., *Int. J. Mol. Sci.*, 2020, p. 4004.
4. D.Yu. Kirsanova, et al., *Mini Rev. Med. Chem.*, 2021, p. 667-668.
5. G.M. Gadzhimagomedova, et al., *Int. J. Mol. Sci.*, 2021, p. 13040.
6. D.Yu. Kirsanova, et al., *Nanomaterials*, 2021, p. 3212.

7. V.A. Polyakov, et. al., Materials, 2022, p. 8559.

ПРОТОННО-ОБМЕННЫЕ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСНЫХ СТРУКТУР MIL-88A И HKUST-1

И.Е. Горбань, М.А. Солдатов

Международный исследовательский институт интеллектуальных
материалов Южного федерального университета,
Gorivan96@gmail.com

Электрохимические методы хранения и преобразования энергии в настоящее время являются лучшими решениями для ряда задач человечества, таких как: сокращение глобальных выбросов CO₂, освоение арктики и космоса. Водородные топливные элементы с протонно-обменной мембраной являются перспективным источником энергии с широким спектром применений [1]. Данные топливные элементы представляют собой два электрода (анод и катод) между которыми располагается протонно-обменная мембрана. Функции мембран заключаются в обеспечении каналов для миграции и транспорта протонов, а также для разделения газовых реагентов и изоляции электронов [2]. Важнейшим свойством мембран является их способность удерживать воду, поскольку проводимость мембран напрямую зависит от уровня гидратации мембраны. Использование металлоорганических каркасов (МОК) в синтезе полимерных мембран позволяет улучшить их свойства за счет их высокой удельной площади поверхности и большого размера пор.

В данной работе протонно-обменные мембраны, состоящие из сегментов полисульфона, полифенилсульфона и поли(эфирсульфона) (SPES) изготавливались с добавлением МОК MIL-88a и HKUST-1. По результатам проведенных анализов было выявлено, что добавление МОК увеличивает водопоглощение мембран на 20% при температуре 30 °С, и на 40% при температуре 60 °С. Также при использовании МОК увеличивается ионнообменная емкость, и ионная проводимость. Полученные мембраны также были протестированы на лабораторной топливной ячейке, где удельная мощность в рабочих условиях достигала 1040 мВт/см².

Литература.

1. Jacobson, M.Z., W.G. Colella, and D.M. Golden, Cleaning the Air and Improving Health with Hydrogen Fuel-Cell Vehicles. Science.
2. Parnian, M.J., et al., High durability sulfonated poly (ether ether ketone)-ceria nanocomposite membranes for proton exchange membrane fuel cell applications. Journal of Membrane Science, 2018. 556.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗЫ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА

М.А. Грицай, М.А. Солдатов

Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, gritsai@sfedu

Современные наноматериалы быстро развиваются и обещают, что будут применимы к широкому спектру областей, таких как аэрокосмическая промышленность, наноэлектроника, восстановление окружающей среды и медицинское обслуживание [1, 2]. В этих областях наночастицы феррита кобальта рассматриваются как одни из перспективных материалов из-за своих физических, химических и магнитных свойств, таких как высокая постоянная анизотропия, высокая коэрцитивная сила и высокая температура Кюри, умеренная намагниченность насыщения и простота синтеза [3].

Наночастицы феррита кобальта были синтезированы путем осаждения хлоридов железа и кобальта с дальнейшим высоко температурным отжигом. Для определения элементного и структурного состава полученных веществ, были проведены следующие исследования: рентгеновская дифракция, электронная микроскопия, Мёссбауэрская спектроскопия, рентгеновская спектроскопия поглощения.

В данной работе, был проведен анализ образцов при помощи метода рентгеновской спектроскопии XANES за K-краями кобальта и железа. По результатам исследования и проведенной линейной комбинации, можно сказать, что полученные наночастицы содержат ионы железа (Fe^{3+}) занимающие октаэдрические позиции кристаллической решетки образца. В свою очередь, ионы кобальта (Co^{2+}) занимают тетраэдрические позиции в полученной структуре. Результаты проведенных исследований демонстрируют, что фазовый состав полученных наночастиц соответствует составу феррита кобальта.

Литература.

1. Amiri, S. and H. Shokrollahi, The role of cobalt ferrite magnetic nanoparticles in medical science. *Materials Science and Engineering: C*, 2013. **33**(1): p. 1-8.
2. Jauhar, S., et al., Tuning the properties of cobalt ferrite: a road towards diverse applications. *RSC Advances*, 2016. **6**(100): p. 97694-97719.

3. Jonker, G.H., Analysis of the semiconducting properties of cobalt ferrite. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1959. **9**(2): p. 165-175.

ИЗГОТОВЛЕНИЕ РЕГУЛЯРНЫХ УСКОРЯЮЩИХ СЕКЦИЙ ДЛЯ ИНЖЕКТОРА СИБИРСКОГО КОЛЬЦЕВОГО ИСТОЧНИКА ФОТОНОВ

К.А. Гришина

Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН,
K.A.Grishina@inp.nsk.su

В Новосибирске с 2019 года реализуется проект Сибирского кольцевого источника фотонов – СКИФ [1]. Одной из частей комплекса является инжектор электронов, который состоит из источника частиц, группирователя и регулярных ускоряющих секций на основе диафрагмированного волновода. В работе представлен анализ необходимых точностей изготовления ускоряющих ячеек, начальных параметров пучка и особенностей продольной и поперечной динамики в ускоряющей структуре на основе диафрагмированного волновода, производимой в ИЯФ СО РАН [2]. Описан процесс производства элементов ускоряющих структур, дальнейшее изготовление и измерения электродинамических характеристик группирователя и регулярных ускоряющих секций.

Литература.

1. Институт ядерной физики имени Г.И.Будкера СО РАН [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.inp.nsk.su/nauka/issledovatelskaya-infrastruktura/proekty/sibirskij-istochnik-si/> (дата обращения: 15.02.2023).
2. 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.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙТРОННОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ГЕЛИКОИДАЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Д.И. Девятериков, Е.А. Кравцов, В.Д. Жакетов*, Ю.В. Никитенко*

Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН,
devidor@yandex.ru

*Объединенный Институт Ядерных Исследований

Доклад посвящён использованию рефлектометрии поляризованных нейтронов (РПН) [1] для исследования атомной и магнитной структуры тонких плёнок и магнитных сверхрешёток на основе редкоземельных металлов Ду и Но. Для объёмных монокристаллов Ду и Но характерно существование геликоидального магнитного упорядочения в широком диапазоне температур и полей [2,3], которое наблюдается и в наноструктурах на их основе [4], с существенными отличиями в свойствах магнитного геликоида. Результатом изучения тонких плёнок (200 нм) Ду и Но и сверхрешётки [Dy (6 нм.) / Ho (6 нм.)]³⁴, синтезированных методом магнетронного распыления, в температурном диапазоне 1.5 ÷ 200 К и внешнем поле 1 кЭ, стало подтверждение того, что:

1) В сверхрешётке Ду/Но образуется две когерентно распространяющиеся в слоях Ду и Но соответственно магнитных геликоиды, периоды которых существенно превышают таковые в объёмных Ду и Но.

2) В слоях Но как в тонкой плёнке, так и в сверхрешётке, обнаружено отсутствие перехода в соизмеримую коническую фазу, наблюдающегося в объёмном Но.

3) В слоях Ду в сверхрешётке и в тонкой плёнке Ду при определённых температурах и значениях внешнего магнитного поля наблюдается нехарактерный для монокристаллов Ду эффект сосуществования ненулевой компоненты намагниченности вдоль направления внешнего магнитного поля и периодического магнитного упорядочения.

Литература.

1. H. Zabel, K. Theis-Bröhl. Journal of Physics: Condensed Matter. 15, S505 (2003).
2. J. Yu et al. Phys. Rev. B 91, 014404 (2015).
3. M. J. Pechan, C. Stassis. Journal of Applied Physics 55, 1900 (1984).
4. J.A. Simpson et al. J. Phys.: Condens. Matter 8, L187 (1996).

ТЕСТОВЫЙ НЕЙТРОННЫЙ РЕФЛЕКТОМЕТР НА РЕАКТОРЕ ПИК

М.В. Дьячков, В.А. Ульянов, В.Г. Сыромятников

НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, dyachkov_mv@npri.nrcki.ru

Одной из первых научных установок на реакторе ПИК в 2020 году был установлен тестовый нейтронный рефлектометр (ТНР) на канале ГЭК-9. ТНР может работать в четырех режимах: «белый» неполяризованный пучок (I режим - времяпролетный), «белый» поляризованный пучок (II режим - времяпролетный), монохроматический неполяризованный пучок (III режим - с фиксированной длиной волны), монохроматический поляризованный пучок (IV режим - с фиксированной длиной волны). Расчетные параметры ТНР для ГЭК-9: максимальный доступный диапазон по переданному импульсу в рефлектометре $q = (0,003 - 0,275) \text{ \AA}^{-1}$. Расчетный максимальный интегральный поток на образце порядка $2,6 \cdot 10^6 \text{ н/см}^2\text{с}$ (I режим). Разрешение по длине волны во времяпролетных режимах (I и II) $\Delta\lambda = 0,06 \text{ \AA}$. В режиме II в рабочем диапазоне длин волн $\lambda = (0,88 - 4,7) \text{ \AA}$ средняя величина поляризующей эффективности поляризатора составляет 0,97-0,99. Впервые на реакторе ПИК были проведены рефлектометрические спектральные измерения зеркального образца.

Литература.

1. V.G. Syromyatnikov, N.K. Pleshanov, V.M. Pusenkov et al. // Four-modes neutron reflectometer NR-4M. - Preprint PNPI № 2619, Gatchina (2005) p.47.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ БИФТАЛАТА РУБИДИЯ МЕТОДОМ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩЕЙ ТРЕХКРИСТАЛЬНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Э.С. Ибрагимов^{1,2}, А.Г. Куликов^{1,2}, Н.В. Марченков^{1,2}, Ю.В.
Писаревский^{1,2}, А.Е. Благоев^{1,2}, М.В. Ковальчук^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт»

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
ibragimov.es18@physics.msu.ru

Изучение управляемого деформационного поведения материалов и изменения их структурной организации представляет интерес для создания новых энергосберегающих систем записи и хранения информации, а также других элементов микроэлектроники. Одним из возможных способов управления деформациями в нецентросимметричных кристаллах является приложение внешнего электрического поля. Одними из перспективных объектов для данных целей являются кристаллы бифталата рубидия. Ранее пьезоэлектрические свойства бифталата рубидия исследовались методом квазистатических механических нагрузок [1] и методом резонанса-антирезонанса [2]. Однако между значениями пьезоэлектрических модулей, полученных в указанных работах, имеются значительные расхождения.

С использованием метода времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии в трехкристальной схеме измерена деформация решетки кристалла бифталата рубидия ($C_8H_3RbO_4$) во внешнем электрическом поле. При воздействии внешнего импульсного электрического поля вдоль полярной оси [001] независимо по трем рефлексам 400, 070 и 004 определены пьезоэлектрические модули d_{31} , d_{32} и d_{33} , значения которых составили соответственно -32.8 ± 0.6 , 12.8 ± 0.3 и 21.8 ± 1.2 пКл/Н. Обнаружено хорошее соответствие полученных в данной работе величин пьезоэлектрических модулей значениям, полученным ранее квазистатическим методом.

Литература.

1. S. Haussuhl. Z. Kristallographie 196, 1–4, 47 (1991).
2. Г.С. Беликова, Ю.В. Писаревский, И.М. Сильвестрова. Кристаллография 19, 4, 878 (1974).

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ ОКСИДА ГАЛЛИЯ МЕТОДАМИ АКУСТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Д.А. Калганов, В.В. Каминский, Д.Ю. Панов

Университет ИТМО, kalganov@itmo.ru

На сегодняшний день актуальность исследования полупроводниковых материалов на основе оксида галлия связана с перспективами использования их в устройствах силовой электроники и оптоэлектроники [1]. Основные свойства таких материалов, такие как зонная структура, динамика носителей заряда и напряжение пробоя в высокой степени зависят от наличия и типа дефектов [2]. Разработка новых методов исследования дефектной структуры объёмных кристаллов оксида галлия для совершенствования технологий их выращивания, улучшения транспортных и других свойств является одним из ключевых факторов его практического применения в устройствах электроники [1].

Данная работа посвящена изучению дефектной структуры объёмных кристаллов бета формы оксида галлия методами акустической спектроскопии. Исследуемые образцы изготавливали механической резкой при помощи алмазной пилы из кристаллических сростков, полученных методом Степанова. Размеры образцов варьировались от 18 до 50 мм в длину и составляли ~ 3 мм для поперечного сечения квадратной формы. Температурные зависимости внутреннего трения и модуля Юнга на частотах около 100кГц были получены с использованием метода составного осциллятора. Характерные значения этих величин для комнатной $T = 300$ К температуры: $\sigma = 10^{-2}$ и $E = 227$ ГПа.

Зарегистрированы акустические эффекты, отражающие релаксационные процессы на границе кристаллитов в интервале температур $270 \div 290$ К, а также соответствующие взаимодействию упругих полей дислокаций с различными типами точечных дефектов при низких $T < 220$ К температурах.

Литература.

1. J. Yang, Prog. Quantum. Electron. 83, 100397 (2022).
2. T. Kawamura, Jpn. J. Appl. Phys. 61, 021005 (2022).

СИНХРОТРОННЫЙ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ТЕХНОГЕННЫХ ПОЧВ РАЙОНА ВОЗДЕЙСТВИЯ ХИМИЧЕСКОГО КОМБИНАТА

М.В. Киричков, В.А. Шуваева, Д.Г. Невидомская, Т.М. Минкина

Южный федеральный университет, mikhail.kirichkov@gmail.com

Минералогия в и почвах намного сложнее, чем в зональных почвах из-за нетипичных аутигенных минералов, формирующих техногенные минеральные фазы, поэтому было проведено исследование образцов загрязненных почв при помощи метода рентгеновской порошковой дифракции (X-Ray Powder Diffraction, XRPD). Посредством XRPD можно получить информацию как о фазовом, так и об элементном составе исследуемого образца.

Объектом исследования являлись высокозагрязненные почвы (хемохемы) бывшего шламонакопителя, расположенные на территории оз. Атаманское, в пойме реки Северский Донец Каменск-Шахтинского района Ростовской области. Предметом исследования были выбраны металлы Cu, Zn, Cr, Mn, Cd, Ni, Ti и Pb, являющиеся одними из наиболее распространённых загрязняющих веществ почвенного покрова изучаемых территорий.

Исследования выполнены в Курчатовском центре синхротронного излучения (КИСИ) НИЦ «Курчатовский институт». Рентгеноструктурное исследование образцов проводилось методом XRPD на станции КИСИ «Белок / XSA». Использовалось монохроматическое излучение с длиной волны 0,8 Å (энергия фотона 15498 эВ).

Установлено, что в исследуемых почвах выявлено большое разнообразие металл-содержащих фаз, таких как Монтмориллонит, Пирит, Периклаз, Франклинит, Ковеллит и проч. Имеют место быть изоморфные замещения в составе слоистых алюмосиликатов. Анализ также показал, что в хемоземах по сравнению с составом фоновых незагрязненных почв, значительно снизилась концентрация Mg, Al и Fe, и, напротив, повысилась концентрация Zn, Pb, Cu.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 21-77-20089.

НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ BaGdF₅ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ

Д.Ю. Кирсанова, З.М. Гаджимагомедова, В.А. Поляков, И.А. Панкин, А.В. Солдатов

Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, dkirsanova@sfsedu.ru

Известно, что использование рентгеновских лучей может расширить возможности фотодинамической терапии при лечении глубоко расположенных опухолей [1]. Одним из перспективных материалов для преобразования рентгеновского излучения в оптическое являются наночастицы, допированные ионами редкоземельных элементов [2-5]. Так в данной работе были синтезированы и исследованы различные составы рентгеновских наноломинофоров на основе BaGdF₅, допированных ионами Tb³⁺. Большое внимание уделяется анализу их характеристик, таких как размер, структурные и спектральные особенности, а также влиянию параметров синтеза на размер наночастиц. По результатам XEOL-анализа (XEOL, X-ray excited optical luminescence) выявлено, что образец BaGdF₅:25%Tb продемонстрировал наибольший выход люминесценции и поэтому является оптимальным выбором для преобразования рентгеновского излучения в оптическое [6, 7]. Было выявлено, что размеры этих наночастиц (до 20 нм) удовлетворяют требованиям для последующего синтеза нанокomпозитов для рентгеновской фотодинамической терапии. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-15-00305-П).

Литература.

1. L. Larue, Photochem. Photobiol. Sci., 2018, 17, p. 1612–1650
2. M.H. Chen, et al., Nanoscale Res. Lett., 2017, 12, p. 62.
3. D. Kirsanova, et al., Mini Rev. Med. Chem., 2020, 21, p. 677-688.
4. Z. Gadzhimagomedova, et al., Int. J. Mol. Sci. 2020, 21, p. 4004.
5. Z. Gadzhimagomedova, et al., Int. J. Mol. Sci. 2021, 22, p. 13040.
6. D. Kirsanova, et al., Nanomaterials, 2021, 11, p. 3212.
7. V. Polyakov, et al., Materials, 2022, 15, p. 8559.

БИОГЕННЫЙ СИНТЕЗ СКАФФОЛДОВ РАЗЛИЧНОЙ МОРФОЛОГИИ ДЛЯ БИМЕДИЦИНЫ

Е.Р. Коломенская, Е.А. Муханова, А.В. Солдатов*

Южный Федеральный Университет, kolomenskaya@sfned.ru
* Международный исследовательский институт интеллектуальных
материалов "МИИ ИМ"

Материалы на основе гидроксиапатита кальция широко изучаются и испытываются в области материалов для тканевой инженерии. Такие материалы, за счет своей хорошей биосовместимости, отлично подходят на роль каркасов (скаффолдов) для костных имплантов [1,2]. Для их изготовления необходимо обеспечить остеокондуктивность - позволить костным клеткам образовывать внеклеточный матрикс на своей поверхности и в порах, создать разветвленную, трехмерную, сообщающуюся систему пор [3].

В данной работе в качестве порообразователей использовались экологичные материалы: манная крупа, дрожжевые клетки, люфа, рапсовая мука, мука подсолнечника, конжак, скорлупа кедрового ореха и др. В качестве материала скаффода был использован фосфат стронция-германия. Фазовый состав был установлен методом рентгеноструктурного анализа. Микроструктура образцов исследовалась методом сканирующей электронной микроскопии на ZEISS CrossBeam-340. Пористость определялась методом БЭТ, изотермы адсорбции-десорбции азота измеряли при -196 °С на анализаторе Accelerated Surface Area and Porosimetry Analyzer ASAP 2020.

Была получена серия скаффолдов с механическими свойствами средни человеческой кости. Материалы обладают антибактериальным эффектом, проверенным в биологических испытаниях.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2021-1363).

Литература

1. Motamedian S.R. Smart scaffolds in bone tissue engineering: A systematic review of literature // World J. Stem Cells. 2015. Vol. 7, № 3. P. 657.
2. Preethi Soundarya S. et al. Bone tissue engineering: Scaffold preparation using chitosan and other biomaterials with different design and fabrication techniques // Int. J. Biol. Macromol. Elsevier B.V., 2018. Vol. 119. P. 1228–1239.
3. Zadpoor A.A. Bone tissue regeneration: The role of scaffold geometry // Biomater. Sci. Royal Society of Chemistry, 2015. Vol. 3, № 2. P. 231–245.

МЕТОДИКИ АТТЕСТАЦИИ ОНДУЛЯТОРОВ ДЛЯ СИНХРОТРОНА “СИЛА”

А.С. Комлев, А.А. Амиров

НИЦ Курчатовский Институт, komlev.as16@physics.msu.ru

Ондуляторы - это устройства, которые используются для генерации монохроматических рентгеновских лучей в синхротронах. Важной задачей в создании синхротронов является обеспечение стабильной работы ондуляторов, что достигается путем аттестации их магнитных свойств с дальнейшей настройкой [1].

В докладе сообщается об основных методиках аттестации магнитных свойств ондуляторных систем, которые планируется использовать для характеристики устройств, проектируемых для синхротрона “СИЛА”. Основными методиками аттестации ондуляторов и их компонентов являются: Холловская магнитометрия, метод натянутой струны, определение гистерезисных свойств постоянных магнитов при помощи катушек Гельмгольца. Данные методики позволят определить магнитные свойства постоянных магнитов, пространственное распределение магнитной индукции в зазоре ондулятора, первый и второй интегралы магнитного поля, фазовую ошибку [2].

Также для ондуляторов предъявляются жесткие требования к позиционированию отдельных его элементов друг относительно друга и позиционированию элементов измерительных стендов относительно ондулятора. В докладе будет сообщено о различных современных методиках, позволяющих решить эти проблемы. Также обсуждаются возможные трудности, связанные с проведением тестов на аттестацию магнитных свойств ондуляторов, и предлагаются решения для их решения.

В заключение, доклад подчеркивает важность проектирования лаборатории для аттестации магнитных свойств ондуляторов в создании стабильной работы синхротронов.

Литература.

1. Brown G. et al., Nucl. Instr. and Met. in Phys. Res., 208.1-3 (1983): 65-77.
2. Diviacco, Bruno, Richard P. Walker. Nucl. Instr. and Met. in Phys. Res. Sec. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 368.2 (1996): 522-532.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ НАНЕСЕННЫХ ХЛОРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ МЕТОДАМИ XAS-СПЕКТРОСКОПИИ

И.О. Краснякова, А.А. Гуда, А.Л. Бугаев*, Д.В. Никитенко**

Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, okreneri@gmail.com
* SuperXAS beamline, Paul Scherrer Institute

** Институт физико-органической химии и углекислоты им. Л.М. Литвиненко

Каталитическое гидрохлорирование ацетилена – способ получения винилхлорида (ВХМ), мономера многотоннажного пластика поливинилхлорида. Именно таким путем получают около одной трети общемирового объема ВХМ (~13 млн т/год) [1]. Процесс использует токсичный быстро дезактивирующийся катализатор на основе Hg, сублимация которой пагубно влияет на биосферу и снижает экономические показатели производства, что требует его незамедлительной замены. Рациональный дизайн промышленно эффективного экологически дружелюбного гетерогенного катализатора возможен при понимании состояния его поверхности.

В качестве альтернативных каталитических систем мы исследовали нанесенные на активированный уголь хлоридные комплексы палладия с массовой загрузкой активного металла 0.5-5 %. Для всех образцов данные XAS-спектроскопии свидетельствуют о сохранении на поверхности угля структуры PdCl₂: в спектрах XANES край поглощения отвечает Pd²⁺, в EXAFS-спектрах не зафиксирован вклад связей Pd-Pd, отвечающий Pd⁰. Во всех катализаторах параметр Дебая-Уоллера увеличен по сравнению со стандартной массивной солью – большой беспорядок свидетельствует о малых размерах нанесенных частиц.

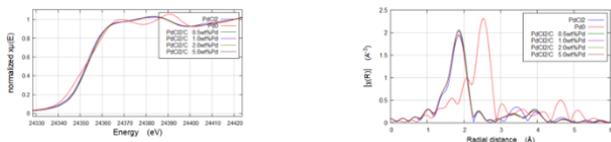


Рис. XAS-спектры PdCl₂/C с разной загрузкой активного металла.

Литература.

1. S.K. Kaiser, et al., ChemCatChem., 2020, V. 12, № 7. P. 1922-1925.
doi:10.1002/cctc.201902331

**РАЗВИТИЕ МЕТОДИК ЭЛЕМЕНТНОГО АНАЛИЗА
БИОПСИЙНОГО МАТЕРИАЛА ТКАНЕЙ РЫБ И СТЕНКИ
АОРТЫ ПРИ АНЕВРИЗМЕ МЕТОДОМ
РЕНТГЕНОТФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ (РФА-
СИ)**

Е.С. Крупович

Новосибирский Государственный Университет (НГУ), кафедра Химии
твёрдого тела, e.krupovich@g.nsu.ru

Количественное определение содержания химических элементов в биопсийных образцах является сложной задачей, в связи с малым количеством образца (до 1 мг) и вариабельностью элементного состава, что накладывает ограничения в использовании классических методов элементного анализа. Рентгенофлуоресцентный анализ с синхротронным излучением (РФА-СИ) – многоэлементный неdestructивный метод анализа, исключающий риски загрязнения образца или потери элементов в процессе пробоподготовки [1]. СИ, как источник рентгеновского излучения, имеет интенсивность на 4 порядка выше, чем рентгеновская трубка, что дает возможность работать с образцами микромалой массы (0,5-10 мг), сокращает время измерения пробы, а низкая радиальная расходимость пучка позволяет проводить одно- и двумерное пространственное сканирование образца и создавать карты распределения элементов. Биопсийный материал требует индивидуального подхода в пробоподготовке для всех видов тканей.

Работа носит интеграционный характер с участием НГУ и следующих институтов СО РАН: Лимнологический институт СО РАН, г. Иркутск, Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск, Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, ФГБУ «НМИЦ им. ак. Е.Н. Мешалкина» Минздрава России, г. Новосибирск.

В живых организмах находится до 70 химических элементов, при этом на данный момент медиками широко используются данные по 12-14 химическим элементам, именно поэтому определение химических элементов в биопсийном материале является перспективной задачей в области медицины. Для разработки методик элементного анализа были предоставлены различные ткани сига-пыжьяна - мозг, жабры, сердце, печень, почки, чешуя, а также

мышечная ткань байкальского омуля, большой и малой голомянки. НМИЦ им. ак. Е.Н. Мешалкина была поставлена задача изучения изменения элементного состава стенки аорты при патологии аневризмы. Пробоподготовка для каждого вида тканей проводилась с индивидуальными условиями. В зависимости от поставленных задач подбирали энергию возбуждающих квантов для многоэлементного анализа, определялись элементы от К до Мо. Концентрации элементов определены методом внешнего стандарта с применением международных стандартных образцов. Проведено одномерное сканирование РФА-СИ чешуйной пластинки сига-пыжьяна, по результатам которого, элементы делятся на группы по характеру распределения: равномерное распределение и соответствующее годовым кольцам. Чешуйная пластинка рыб состоит из годовых колец, т.о. полученные данные показывают изменение распределения элементов с возрастом рыбы [2].

Разрыв стенки аневризмы является основной причиной летального исхода в сердечно-сосудистых заболеваниях. Нами разрабатываются методические подходы к исследованию материала аневризмы на разных стадиях патологии. Измерения проводились на станции № 3 «Экспериментальная станция Рентгенофлуоресцентного элементного анализа» ускорительного комплекса ВЭПП-3 и станции № 8 ВЭПП-4М, ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск.

Учитывая все особенности и возможности РФА-СИ необходима разработка методических подходов для анализа биопсийных образцов.

Литература.

1. Трунова В.А., Сидорина А.В., Зверева В.В. Оценка возможности применения прямого анализа образцов биотканей малой массы методом рентгенофлуоресцентного анализа с синхротронным возбуждением//Аналитика и контроль. 2015. Т. 19. № 2.
2. Yoshitomi T., Nakayasu C., Hasegawa S., Iida A., Okamoto N. Site-specific lead distribution in scales of lead-administered Carp (*Cyprinus carpio*) by non-destructive SR-XRF analysis// Chemosphere, 1998. Vol.36.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНСТРУКТИВНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ДРЕВНЕРУССКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ БРАСЛЕТОВ

**А.Ю. Лобода¹, И.Е. Зайцева², А.В. Мандрыкина¹, П.В. Гурьева¹,
Е.С. Коваленко¹, Е.Ю. Терещенко^{1,3}, Е.Б. Яцишина¹**

¹ НИЦ «Курчатовский институт», lobodaau@mail.ru

² Институт археологии РАН

³ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

В августе 2021 года в окрестностях Старой Рязани около села Исады был найден клад украшений и денежных слитков, который предварительно датируется в пределах конца XI – первой половины XII века. Три плетеных браслета с фигурными наконечниками, входящие в клад, стали объектом данного исследования. Особый интерес представляла конструкция изделий и состав металла, из которого они изготовлены. Состав определяли методом РЭМ/ЭРМ на микроскопе Helios. Для визуализации внутреннего строения применяли методы нейтронной и рентгеновской томографии (НТ/РТ). НТ выполнялась на установке с полихроматическим спектром нейтронов на горизонтальном экспериментальном канале № 76 ИР-8, РТ на промышленном рентгеновском томографе X5000 (NSI).

Все составные детали браслетов выполнены из высокопробного серебра (Ag 80 – 92 %), их состав незначительно отличается друг от друга. Определено, что браслеты изготовлены из жгутов, сплетенных из проволок круглого сечения, и наконечников с накладками. Жгуты двух изделий (№ 1, 3) изготовлены переплетением семи проволок, внутри жгута третьего браслета (№ 2) присутствует восьмая проволока – каркас. Установлено, что проволоки жгута прикреплены к наконечникам с помощью пайки. Припой ослабляет рентгеновское излучение на 10 % сильнее металла проволок и состоит из менее высокопробного серебра. Наконечники были прокованы и припаяны к жгутам, затем на них закреплялись накладки. Литые каплевидные накладки – полые, отливались со штырями, путем расклепывания которых они фиксировались на наконечниках. Накладки двух браслетов (№ 1, 3) крепятся на одном расклепанном штыре, а накладки третьего (№ 2) на двух. Таким образом, был реконструирован процесс изготовления серебряных браслетов и получены новые знания о технологических возможностях и традициях древнерусского ремесла в эпоху его становления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии № 075-15-2023-010 от 21.02.2023 (№ 075-15-2022-1177).

ОСОБЕННОСТИ КРАСНОЛАКОВОЙ КЕРАМИКИ РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ЦЕНТРОВ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ

А.В. Мандрыкина¹, П.В. Гурьева¹, Д.В. Журавлев^{1,2}, Е.Ю.
Терещенко^{1,3}, Е.Б. Яцишина¹

¹НИЦ «Курчатовский Институт», mandrykina_av@mail.ru

²Государственный исторический музей

³ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Краснолаковая керамика, или *terra sigillata* – высококачественная столовая посуда римского времени, возникшая около середины II в. до н.э. в Восточном Средиземноморье. Изучение данного типа объектов занимает особое место ввиду возможности их относительно узкого датирования. Это делает краснолаковую керамику важнейшим хронологическим индикатором, дает возможность исследовать торгово-экономические связи провинции с римскими гончарными центрами и выявить локальные особенности производства.

Применение метода рентгеновской томографии представляет особый интерес при исследовании керамических артефактов благодаря возможности визуализировать внутреннее строение объектов без разрушения образца – произвести оценку пор и включений как по размеру, так и по их процентному содержанию, что особенно важно в условиях ограниченного пробоотбора.

Проведено исследование внутренней структуры 25 образцов боспорской (Босп.) и понтийской (Понт.) краснолаковой керамики с помощью промышленного рентгеновского томографа X5000 (NSI). Сопоставление параметров двух групп объектов показало, что для большинства образцов Понт. сигиллаты характерно более низкое содержание пор (1.16-2.49%) и их меньшие размеры ($0.2\text{-}240\cdot 10^{-3}\text{ мм}^3$) по сравнению с Босп. сигиллатой (2.02-7.22% и $1\cdot 10^{-3}\text{-}7\text{ мм}^3$, соответственно). При этом включений в керамике Понт. группы больше (Понт.: 0.33-4.15%, Босп.: 0.16-2.09%), хотя они имеют меньшие размеры по сравнению с объектами Босп. группы (Понт.: $0.15\text{-}59\cdot 10^{-3}\text{ мм}^3$, Босп.: $0.16\text{-}180\cdot 10^{-3}\text{ мм}^3$).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии № 075-15-2023-010 от 21.02.2023 (№ 075-15-2022-1177).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ КАРТ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ПЛЁНОК С УЧЁТОМ НАРУШЕНИЯ ГОРИЗОНТАЛЬНОГО ПОРЯДКА

Л.Р. Муфтахова

НИЦ Курчатовский Институт,
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), кафедра нано, био, информационных и когнитивных технологий, muftakhova.lr@phystech.edu

Ленгмюровские плёнки представляют собой двумерные упорядоченные молекулярные ансамбли на поверхности жидкости. Благодаря процессам самоорганизации, они формируют упорядоченную структуру, от которой зависят свойства функционального материала. Молекулы, составляющие плёнку, имеют нанометровый масштаб. Следовательно, дифракция рентгеновских лучей позволяет исследовать кристаллическую структуру плёнки. Для увеличения поверхностной чувствительности используется метод дифракции в скользящей геометрии[1]. По характерным дифракционным картинам можно определить параметры кристаллической структуры, геометрическую форму молекул, статистические параметры ориентаций молекул, размеры кристаллитов, степень разупорядоченности в системе[2-3].

В недавних экспериментах по малоугловой дифракции на плёнках арахидиновой кислоты мы наблюдали необычную картину: дифракционные пики искривлены, в то время как типичная дифракционная картина для двумерного ансамбля представляет собой вертикальные стержни. Одним из возможных объяснений возникновения искривлённых максимумов: нарушение горизонтального порядка в двумерном поликристалле. На основе этого предположения мы разработали теоретическую модель дифракции, которая позволяет численно воспроизвести искривления «хвостов» дифракционных пиков. Разработан алгоритм, позволяющий проводить численное моделирование двумерных картин дифракции в обратном пространстве с учётом искривления «хвостов».

Литература.

1. K. Kjaer, Phys. V.: Condensed Matter, 198(1-3), 100-109 (1994).
2. V.M. Kaganer, et al., Reviews of Modern Physics, 71(3), 779 (1999).
3. M.A. Chuev, et al., Crystallography Reports, 65(5), 772-778 (2020).

КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА КАРБОНИЗАЦИИ МОРСКОЙ ГУБКИ

О.В. Петрова, К.А. Бакина, С.В. Некипелов, В.Н. Сивков, Д.В.
Сивков

ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, teiou@mail.ru

Морские губки подкласса *Keratosa* характеризуются хорошо развитым, анастомозирующим спонгиновым скелетом, который иерархически организован в первичные и вторичные структуры волокон и составляет значительную часть объема тела губки. Ранее нами было показано, что в процессе карбонизации спонгинового матрикса морской губки при 1200 °С в аргоне происходит формирование трехмерной нанопористой структуры турбостратного графита, которая может служить основой для получения новых композиционных катализаторов [1].

В данной работе представлены результаты комплексного исследования процесса карбонизации морской губки вида *Hippospongia communis* (*H. communis*) при термической обработке в атмосфере аргона в интервале температур от комнатной до 1200 °С. Характеризация образцов проводилась комплементарным набором физических методов, включающим рентгеновский энергодисперсионный, термогравиметрический анализ (EDX-TGA-DTGA), дифференциальную сканирующую калориметрию (DSC), Рамановскую спектроскопию, сканирующую электронную микроскопию (SEM), XPS и NEXAFS-спектроскопию.

В результате проведенных исследований было показано, что в процессе прогрева в инертной атмосфере 3D-архитектура исходной губки на макро- и микроуровнях сохраняется, при этом происходит графитизация межспонгинового матрикса с образованием турбостратного графита высокой пористости.

Проведенные исследования впервые продемонстрировали, что процесс графитизации морской губки с образованием турбостратного графита напрямую зависит от состава и свойств матрикса, содержащего большое количество ароматических соединений и расположенного вокруг волокон спонгина [2].

Литература.

1. I. Petrenko et al., *Sci. Adv.* 2019, 5, p. eaax2805(11).
2. O.V. Petrova et al., *Appl. Sci.* 2023, 13, p. 128(13).

СПЕКТРАЛЬНОЕ И DFT-ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ЭТИЛЕНА И 1-МСП В MOF ДЛЯ ТЕХНОЛОГИЙ СОХРАНЕНИЯ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ

А.Ю. Пневская, А.Л. Бугаев*

МИИ ИМ ЮФУ, annpnevskaya@yandex.ru

* Институт Пауля Шерпера

Металлоорганические каркасные полимеры (MOF) имеют потенциальное применение в хранении/разделении газа. Поглощение этилена, растительного гормона, из атмосферы или высвобождение 1-МСП, ингибитора этилена, можно использовать для замедления процесса созревания фруктов и овощей [1].

В данной работе мы исследуем центры связывания этилена и 1-МСП в структуре $M_3(btc)_2$ с помощью рентгеновской спектроскопии поглощения (XAS), ИК-спектроскопии и моделирования DFT. Образец HKUST-1 активировали в Ag при 200°C, а затем посылали 10% C_2H_4/Ag при 30°C. Спектры XANES, полученные в нашей лаборатории, соответствуют центрам меди Cu^{2+} , а также дополнены теоретическими спектрами для подтверждения адсорбции этилена. Инфракрасные спектры были получены для HKUST-1 в режиме DRIFTS. После активации на образец посылали 10% C_2H_4/Ag или поток 1-МСП/Ag, полученный *in situ*, при 30°C. Пики при 980 cm^{-1} и 668 cm^{-1} соответствуют модам адсорбированного этилена и 1-МСП в HKUST-1, соответственно. Теоретический скрининг был проведен с использованием теории B3LYP-D4 для поиска лучших кандидатов для адсорбции этилена и десорбции 1-МСП среди структур $M_3(btc)_2$ и CPO-27-M (M= Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) и значения сравнивались с экспериментальными значениями для $Cu_3(btc)_2$.

Результаты продемонстрировали хорошее соответствие экспериментальных и теоретических данных с точки зрения геометрии адсорбции, энергий связи и колебательных спектров [2], а также показали перспективность MOF сорбировать этилен и 1МСП для применения в технологиях продления свежести пищевых продуктов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2021-1363)

Литература.

1. Chopra et.al, Postharvest Biol.Tec. 2017,130,48-55
2. Pnevskaya et.al, J.Phys.Chem.C. 2021,125,22295–22300

СТРУКТУРНАЯ ДИАГНОСТИКА ПИРОХЛОРОПОДОБНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ Y_2FeTaO_7 С ПРИМЕНЕНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Е.Ф. Попова, Р.Д. Светогоров*, Е.С. Куликова*, Е.В. Храмов*, А.В.
Егорышева**

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
lenapopova11a@yandex.ru

* НИЦ Курчатовский Институт

Твердые растворы на основе Y_2FeTaO_7 вызывают интерес исследователей, благодаря наблюдаемым в них необычным магнитным свойствам. В них зафиксировано явление слабого ферромагнетизма при комнатной температуре, причину которого следует искать в особенностях строения подрешеток ионов железа. Настоящая работа посвящена изучению структурных трансформаций происходящих в рядах твердых растворов $Y_{2-x}Fe_{1+x}TaO_7$ и $Y_2Fe_{1-x}Mg_xTaO_{7-\delta}$. Измерения проводили на станциях РСА и СТМ синхротронного центра НИЦ “Курчатовский институт”.

Методом РСА показано, что Y_2FeTaO_7 имеет пирохлороподобную структуру (пр. гр. $R-3$). Также методом XANES установлено, что в Y_2FeTaO_7 наряду с Fe^{3+} присутствуют ионы железа в редкой степени окисления $4+$. Введение в Y_2FeTaO_7 дополнительных ионов железа или магния приводит к одинаковым искажениям кристаллических решеток $Y_{2-x}Fe_{1+x}TaO_7$ и $Y_2Fe_{1-x}Mg_xTaO_{7-\delta}$. Степень этого искажения возрастает с ростом x , что приводит к постепенному понижению симметрии решетки и переходу к низкосимметричной пр. гр. $P3_121$. Таким образом резкого структурного перехода в твердом растворе не наблюдается. $Y_{2-x}Fe_{1+x}TaO_7$ и $Y_2Fe_{1-x}Mg_xTaO_{7-\delta}$ сохраняют слоистый тип структуры, но, в отличие от пр. гр. $R-3$, в пр. гр. $P3_121$ существуют три неэквивалентные позиции в слое Fe/Ta–O полиэдров по которым могут быть распределены ионы железа: в центрах восьмигранника или двух сильно искаженных октаэдров. Существование этих различных взаимодействующих подрешеток ионов железа приводит к возникновению наблюдаемого в этих твердых растворах слабого ферромагнетизма.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского
научного фонда РФФ-22-23-003

АНАЛИЗ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРОВ ЦЕОЛИТОВ КАК НОВАЯ КОЛИЧЕСТВЕННАЯ *IN SITU* МЕТОДИКА ХАРАКТЕРИЗАЦИИ ИХ СТРУКТУРЫ

**Б.О. Проценко, А.А. Скорынина, О.А. Усольцев, С.А. Гуда, А.А.
Гуда, А.Л. Бугаев*, А.В. Солдатов**

Международный исследовательский институт интеллектуальных
материалов ЮФУ “МИИ ИМ ЮФУ”, bprocenko@sfnedu.ru
* Институт Поля Шерпера "PSI"

Применение алгоритмов машинного обучения (МО) к спектроскопическим данным имеет большой потенциал для анализа скрытых корреляций между структурными параметрами и особенностями спектров. В настоящем исследовании мы применили алгоритмы МО к теоретически смоделированным с помощью теории функционала плотности инфракрасным (ИК) спектрам для установления корреляций структура-спектр в цеолитах, которые широко используются в различных промышленных, электронных, медицинских, сельскохозяйственных и других прикладных областях.

В исследовании были рассмотрены все 230 различные топологии цеолитных каркасов, теоретические ИК-спектры которых использовались в качестве выборки для МО. Была решена задача классификации для предсказания наличия или отсутствия возможных строительных единиц цеолитного каркаса. Несколько из них были предсказаны с точностью выше 89 %. Также был предложен набор непрерывных дескрипторов, и для них решена задача регрессии. При решении последней были рассчитаны дополнительные ИК-спектры для структур с искусственно измененными параметрами ячеек, что позволило расширить базу данных до 470 различных спектров цеолитов и косвенно учесть такие особенности структуры, как ионный обмен и включение атомов алюминия. В результате качество предсказания стало выше 90% для средних расстояний Si-O, углов Si-O-Si и объема тетраэдров SiO₄.

Полученные результаты открывают новые возможности для использования инфракрасной спектроскопии в качестве количественного инструмента для *in situ* характеристики цеолитов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2021-1363)

РАЗРАБОТКА ПОТЕНЦИАЛА REAXFF ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ ЗОЛОТО- ПАЛЛАДИЙ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Ю.В. Русалев, Н.В. Тер-Оганесян, А.А. Гуда

ЮФУ МИИ ИМ, yuri.rusalev@gmail.com

Биметаллические катализаторы Pd-M обладают впечатляющими характеристиками во многих реакциях и позволяют настраивать активные центры [1]. Коллоидный раствор наночастиц Pd-Au является перспективным катализатором конверсии метана в метанол при умеренных температурах [2].

Имея в виду важность сплава Pd-Au для каталитических применений, мы представляем точный потенциал типа ReaxFF для систем Pd-Au. Подбор параметров потенциала был произведён на основе DFT-рассчитанной выборки, состоящей из 1014 расчетов различных объемных фаз, поверхностей и наночастиц. Поскольку потенциалы ReaxFF имеют сложную форму и имеют большое количество параметров, можно получить неединственное решение. С помощью валидации на DFT расчётах, не включенных в обучающую выборку, и молекулярной динамики (МД), мы выделили 4 разных набора параметров среди восьмидесяти разных решений. Выбранные потенциалы имеют разные атомные, 2-ух и 3-ёх частичные параметры взаимодействия, но работают одинаково хорошо.

Полученные потенциалы были использованы для изучения упорядочения с помощью гибридного подхода МД+Монте-Карло в сплавах и наночастицах Au-Pd. Ведётся расширение этого потенциала для взаимодействия с органическими молекулами для моделирования задач гетерогенного катализа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2021-1363).

Литература.

1. M. Chen, D. Kumar, Science, 310 (2005) 291
2. N. Agarwal, S. Freakley, Science, 358 (2017) 223

ИССЛЕДОВАНИЯ СВЕРХРЕШЕТОК Fe/Gd, МОДИФИЦИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ГИДРИРОВАНИЯ

А.А. Рыжова, Д.И. Девятериков, Ю.А. Саламатов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского
отделения РАН (ИФМ УрО РАН), a.a.ryzhova@imp.uran.ru

В данной работе исследовалось влияние гидрирования на структурные свойства магнитных сверхрешеток вида Si/Nb(10 нм)[Fe(3.5 нм)/Gd(x нм)]₂₀ [1], где x=1,2,3,5,7,10 нм. Образцы помещались в атмосферу водорода при давлении 720 торр при температурах в диапазоне от 300 К до 400 К на 6 часов, изменение структурных свойств контролировалось ex-situ с помощью рентгеновской дифрактометрии и рефлектометрии (см. рисунок 1).

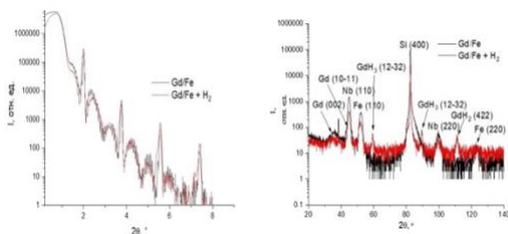


Рис. 1. Рефлектограммы и дифрактограммы сверхрешетки [Gd (2 нм./Fe(3.5 нм)]₂₀, измеренные до и после гидрирования при комнатной температуре

Анализ данных рентгеновской дифракции позволил установить, что после гидрирования в слоях Gd появляются дополнительные фазы GdH₂ и GdH₃. При этом наблюдается рост среднеквадратичной величины шероховатости слоёв Gd с 0.5 до 1 нм и увеличение средней толщины слоя Gd на 0.4 Å из-за проникновения атомов водорода в кристаллическую решётку Gd. Таким образом, была экспериментально доказана возможность гидрирования сверхрешеток Fe/Gd с каталитическим слоем Ni и определено влияние диффузии водорода на химический состав и кристаллическую структуру гидрируемых слоёв Gd.

Литература.

1. Twisted magnetization states and inhomogeneous resonance modes in a Fe/Gd ferrimagnetic multilayer [Текст] / A.B.Drovosekov, A.O.Savitsky, D.I.Kholin, N.M.Kreines, V.V.Proglyado, M.V.Makarova, E.A.Kravtsov, V.V.Ustinov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2019. — V. 475. — P. 668—674

МЕТОД СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН В ГЕОМЕТРИИ СКОЛЬЗЯЩЕГО ВЫХОДА ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ – НОВЫЙ ПОДХОД К СИНХРОТРОННЫМ ИССЛЕДОВАНИЯМ ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУР

А.И. Сафонов

НИИ Курчатовский Институт, safonovanton1996@mail.ru

Наиболее прогрессивным подходом к проведению исследований, в том числе с временным разрешением, является съемка так называемого «рентгеновского кино». Основная идея данного подхода - «исследование за один кадр» без перестройки параметров экспериментальной схемы (углы или энергии).

Используя оптический принцип взаимности [1], демонстрируется новый класс методов СРВ в геометрии «нормальное падение – скользящий выход флуоресценции», в основе которого лежит эффект интерференции характеристического флуоресцентного рентгеновского излучения на внутренних границах, ведущий к появлению т.н. линий Косселя [2]. Сложная структура флуоресцентного сигнала, измеренная в скользящих углах, может быть использована для определения профилей распределения атомов в слоистых системах или атомных позиций в кристаллической решетке.

Показан разработанный алгоритм, расширяющий функционал ПЗС-камер и реализующий позиционно-чувствительный энергодисперсионный анализатор.

Тестирование экспериментальной схемы осуществлялось на слоистых системах W-Ti-W. Показаны результаты спектрально-селективных исследований в бессканирующем режиме в геометрии «нормальное падение – скользящий выход флуоресценции», эквивалентные данным метода СРВ в стандартной геометрии скользящего падения. Показано использование мультиспектрального анализа волновых полей флуоресцентных линий слоистой системы W-Ti-W для восстановления структурных параметров.

Литература.

1. Фёдоров Н.Н. Основы электродинамики. М.: "Высшая школа", 1980. - 399 с.
2. Kossel W., Loeck V., Voges H. Die Richtungsverteilung der in einem Kristall entstandenen charakteristischen Röntgenstrahlung //Zeitschrift für Physik. – 1935. – Т. 94. – №. 1. – С. 139-144.

ЭВОЛЮЦИЯ МАГНИТНОЙ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ В СОЕДИНЕНИЯХ $Mn_{1-x}Fe_xGe$ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО КВАЗИГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

Д.О. Сканченко^{1,2}, Е.В. Алтынбаев^{1,2,5}, N. Martin³, Р.А. Садыков^{2,4},
А.В. Цвященко², С.В. Григорьев¹

¹НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ,
skanchenko_do@npi.nrcki.ru

²Институт физики высоких давлений РАН

³Leon Brillouin Laboratory, SEA Saclay

⁴Институт ядерных исследований РАН

⁵Санкт-Петербургский государственный университет

Соединения $Mn_{1-x}Fe_xGe$, синтезированные при высоком давлении, кристаллизуются в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20 [1]. Отсутствие центра инверсии в расположении магнитных атомов зачастую приводит к возникновению антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского – Мория (ДМ) и, как следствие, образованию гомокиральной магнитной спирали [2, 3].

Анализ эволюции магнитной структуры $MnSi$ и $FeGe$ во внешнем магнитном поле позволил обнаружить образование скирмионной решетки (СкР) или А-фазу [4, 5]. В работе [6] показано, что ни температурный, ни полевой диапазоны области существования А-фазы в соединении $MnSi$ практически не зависят от внешнего давления вплоть до $P = 13$ кбар. При этом температура магнитного упорядочения в этом соединении существенно падает. Известно, что в соединениях $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0,1$ и $0,3$ А-фаза наблюдается в широком диапазоне температур, $30\text{ K} < T < 130\text{ K}$, и полей, $0,8\text{ Тл} < H < 2\text{ Тл}$ [7].

В представляемой работе впервые были проведены исследования спиральных магнетиков $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x=0.1$ и $x=0.3$ под действием квазигидростатического давления до $P = 1$ ГПа в сильном магнитном поле и при низких температурах методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Оказалось, что давление приводит к одновременному увеличению всех критических полей: H_{c1} , H_{c1m} , H_{c2} — при низких температурах и уменьшению температуры магнитного упорядочения, T_c , как для соединений с $x = 0,1$, так и для соединений с $x = 0,3$. Также обнаружено, что в случае соединения $Mn_{0,7}Fe_{0,3}Ge$ увеличение внешнего давления приводит к уменьшению как температурного, так и полевого диапазонов существования А-фазы.

Сравнение эволюции фазовой диаграммы «поле - температура» для соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ и $MnSi$ позволяет подтвердить различную природу основных взаимодействий, формирующих длиннопериодную магнитную структуру в этих соединениях.

Литература.

1. A.V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).
2. I.E. Dzyaloshinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46, 1420 (1964).
3. P. Bak, M.H. Jensen, J. Phys. C 13, L 881 (1980).
4. Н. М. Чубова и др., ЖЭТФ 152, 933—943 (2017).
5. H. Wilhelm et al., Phys. Rev. Lett. 107, 127203 (2011).
6. L.J. Bannenberg et al., Phys. Rev. B 100, 054447 (2019).
7. E.V. Altynabev et al., Phys. Rev. B 101, 100404 (2020).

ВЛИЯНИЕ МАГНИТОУПРУГИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ, ДИФРАКЦИОННЫЕ СВОЙСТВА И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ FeVO₃

Н.И. Снегирёв^{1,2}, А.Г. Куликов^{1,2}, Е.С. Смирнова¹, К.А. Селезнева³,
С.В. Ягунов³, Ю.А. Могиленец³, М.Б. Стругацкий³, О. А.
Алексеева¹, И.С. Любунин¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

²НИЦ «Курчатовский институт», *e-mail niksnegir@yandex.ru

³ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского»

Изучено влияние магнитоупругих взаимодействий на структуру и свойства слабоферромагнитных кристаллов. В качестве модельного объекта выбран борат железа FeVO₃, в котором такие взаимодействия проявляются чрезвычайно сильно. Изготовлен экспериментальный стенд, совместимый со спектрометром ТРС-К и с гониометром, установленным на станции «ФАЗА» КИСИ. Стенд позволяет проводить исследования кристаллов во внешнем магнитном поле.

Установлено, что наличие магнитных доменов, а также эффекты поверхностного магнетизма в FeVO₃, приводят к появлению в кристаллах разупорядоченных областей и к незначительному изменению параметров решетки. Это выражается в уширении кривых дифракционного отражения и расщеплению узлов обратной решетки.

Методом рентгеноструктурного анализа (РСА) получены температурные зависимости параметров кристаллической решетки бората железа. Показано, что в точке магнитного упорядочения наблюдается скачкообразное изменение коэффициентов теплового расширения. Это связано с исчезновением магнитоупругого взаимодействия при переходе образца в парамагнитное состояние. Предложена теоретическая модель, которая позволяет по данным РСА определять компоненты тензора магнитоэластических деформаций.

Учет таких эффектов важен для применения кристаллов FeVO₃ в новых высокотехнологичных отраслях. Кроме того, полученные результаты позволяют использовать кристаллы FeVO₃ в качестве модуляторов рентгеновского излучения.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-29-12016-мк, в части синтеза образцов. РСА проведен в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Методика рентгеновских исследований материалов во внешнем магнитном поле разработана в рамках гранта Минобрнауки РФ № 075-15-2021-1362.

НОВЫЕ ДИЗАМЕЩЕННЫЕ ИМИННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ МАГНИТОАКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ С НАСТРАИВАЕМЫМИ СВОЙСТВАМИ

Ю.В. Стрельникова^{1,2}, И.Д. Шутилов², А.С. Овсянников¹, А.В. Пятаев², Д.Р. Исламов¹, П.В. Дороватовский³, В.А. Лазаренко³, И.А. Литвинов¹, С.Е. Соловьева¹, И.С. Антипин²

¹Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН

²Казанский (Приволжский) федеральный университет

³Национальный Исследовательский центр «Курчатовский институт»

Интерес к координационным соединениям, способным проявлять настраиваемые магнитные свойства, связан с возможностью их применения в квантовых компьютерах [1]. (Тиа)каликс[4]арены и их производные представляют собой привлекательные лиганды для построения магнитоактивных комплексов, благодаря широкой возможности функционализации макроциклической платформы и контроля над координационной сферой ионов *d*-/*f*-металлов [2].

В настоящей работе представлен синтез и изучена кристаллическая структура новых дизамененных производных (тия)каликс[4]аренов, содержащих различные иминофенольные фрагменты, а также их комплексов с парамагнитными ионами *d*-металлов (Fe^{III}, Co^{II/III}, Mn^{III}) (Рисунок 1).

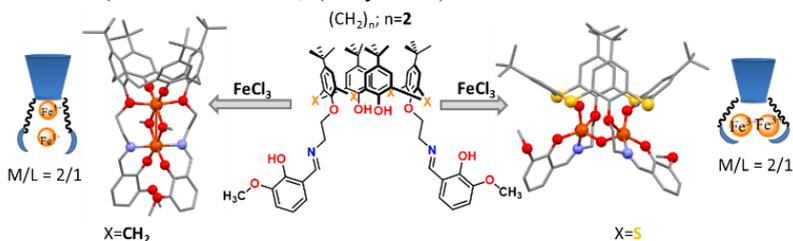


Рис. 1. Влияние природы макроцикла на структуру новых комплексов дизамененных (тия)каликс[4]аренов с Fe (III).

Литература.

1. Jones J.A. Science. 1998. 280. 229-229.
2. Ovsyannikov A., Solovieva S., Antipin I., Ferlay S. Coord. Chem. Rev. 2017, 352, 151–186.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-10139.

ИССЛЕДОВАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ МЛФД С ГЛУБИННЫМИ ПИКСЕЛЯМИ В СЦИНТИЛЛЯЦИОННОМ ДЕТЕКТОРЕ

П.М. Сушкова^{1,2}, Р.А. Акберов¹, С.М. Нуруев¹, С.И. Тютюнников¹

¹Объединенный Институт Ядерных Исследований
²Казанский (Приволжский) Федеральный Университет
psushkova@jinr.ru

Многолетняя исследовательская работа в физике полупроводников [1,2] привела к созданию кремниевых фотоумножителей (МЛФД). В нашей работе представлен сравнительный анализ двух видов полупроводниковых фотодетекторов, твердотельных аналогов вакуумных ФЭУ. В качестве образцов были исследованы фотодиоды с глубинным (MAPD-3NM, MAPD-3NK) и поверхностным расположением пикселей (MPPC_S12572_010P) [3,4].

Проведены измерения ключевых характеристик кремниевых фотоумножителей. Определена эффективность регистрации фотонов, температурные зависимости напряжения пробоя исследуемых образцов. Показано, что наименьшим температурным коэффициентом обладает МЛФД с наименьшим напряжением пробоя. Проверена возможность использования данных фотодиодов в качестве чувствительных элементов в сцинтилляционном детекторе на основе LFS. Получено энергетическое разрешение детекторов в интервале энергий 59,6-1274 кэВ (для Am, Na). Наилучший результат показала сборка на основе LFS и MAPD-3NM с разрешением 20,4% и 17,7%, 12% для Am-241 и Na-22 соответственно.

Литература.

1. K. G. McKay, K. B. McAfee, "Electron multiplication in silicon and germanium," Phys. Rev. 91, 1079–1084 (1953).
2. Sadygov Z., Sadigov A., Khorev S. Silicon photomultipliers: Status and prospects. Physics of Particles and Nuclei Letters., 2020. Т. 17. С. 160-176.
3. Садыгов З.Я. Патент России № 2102820, приоритет от 10.10.1996
4. <https://www.hamamatsu.com/jp/en.html>

КОРРЕЛЯЦИЯ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ В РЕДКОЗЕМЕЛЬНОМ ОРТОФЕРРИТЕ HoFeO_3

О.В. Усманов¹, А.К. Овсяников^{1,2}, И.А. Зобкало¹, К.А.
Шайхутдинов^{3,4}, К.Ю. Тереньтев¹, С.В. Семенов³

¹НИИ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, usmanov_ov@npi.nrcki.ru

²Институт кристаллографии, Университет Аахена RWTH, Aachen

³Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

⁴Сибирский федеральный университет

Исследования кристаллических и магнитных свойств редкоземельного ортоферрита HoFeO_3 были выполнены в диапазоне температур 7 – 300 К. По данным рентгеновской дифракции соединение HoFeO_3 имеет орторомбическую структуру перовскита, пространственная группа $Pbnm$ [1]. Для иона Ho^{3+} численным расчетом получен набор параметров кристаллического электрического поля (КЭП) в рамках модели точечных зарядов (РС) в исследуемом диапазоне температур [2 – 4].

На основе значений параметров КЭП рассчитано расщепление энергетических уровней Ho^{3+} , получена температурная зависимость спектров расщепления, построены кривые изотермической намагниченности $M(H)$. Показано наличие одноионной анизотропии в соединении. Выполнено сравнение макроскопической намагниченности, полученной из набора параметров КЭП с данными измерений [5 – 6].

Литература.

1. Marezio M., et al., Acta Cryst. B 26, 2008 (1970).
2. Stevens K.W.H., Proc. Phys. Soc. A 65, 209 (1952).
3. Hutchings M.T., Point-charge calculations of energy levels of magnetic ions in crystalline electric fields, in Solid State Physics: Advances in Research and Applications 16. Ed. Seitz F., Turnbull D. New York: Academic, (1964).
4. Rotter M., J. Magn. Magn. Mater. 272-276, E481 (2004).
5. Shao M. et al., Solid State Commun. 152, 947 (2012).
6. Ovsianikov A. et al., J. Magn. Magn. Mater. 557, 169431 (2022).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРА ФУНКЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЯ ТОЧКИ СОСТАВНОЙ ПРЕЛОМЛЯЮЩЕЙ ЛИНЗЫ

М.С. Фоломешкин^{1,2}, В.Г. Кон^{1,2}, А.Ю. Серегин^{1,2},
Ю.А. Волковский^{1,2}, П.А. Просеков^{1,2}, В.А. Юнкин³, Д.А. Зверев⁴,
А.А. Баранников⁴, А.А. Снигирёв⁴, Ю.В. Писаревский^{1,2},
А.Е. Благов^{1,2}, М.В. Ковальчук^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский Институт», folmaxim@gmail.com

² ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

³ ИПТМ РАН

⁴ БФУ им. И. Канта

Планарные составные преломляющие линзы [1,2] (СПЛ) являются одним из наиболее эффективных инструментов нанофокусировки пучков синхротронного излучения (СИ) и лазеров на свободных электронах. Важной характеристикой разрешающей способности СПЛ, как и любой фокусирующей системы, является функция изображения точки (ФИТ), описывающая распределение интенсивности в фокусе СПЛ при ее освещении точечным источником излучения. В то же время реальные источники СИ не являются точечными, что накладывает ряд ограничений на экспериментальное определение ФИТ распространенными методами ножевого сканирования и рентгеновской птихографии.

В докладе представлен новый метод экспериментального определения размера ФИТ нанофокусирующей СПЛ. Идея метода заключается в измерении размера углового спектра сфокусированного пучка СИ путем регистрации кривой дифракционного отражения совершенного монокристалла и в дальнейшем расчете размера ФИТ на основании широко развитой теории фокусировки с помощью СПЛ [3]. Апробация метода проведена на Курчатовском источнике СИ на примере планарных нанофокусирующих СПЛ из кремния. Продемонстрирована принципиальная возможность применения предложенного метода для оценки качества изготовления нанофокусирующих СПЛ.

Литература.

1. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva et al., Nature, 1996, 384, p. 49-51.
2. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn et al., Phys. Rev. Lett., 2009, 103, 064801

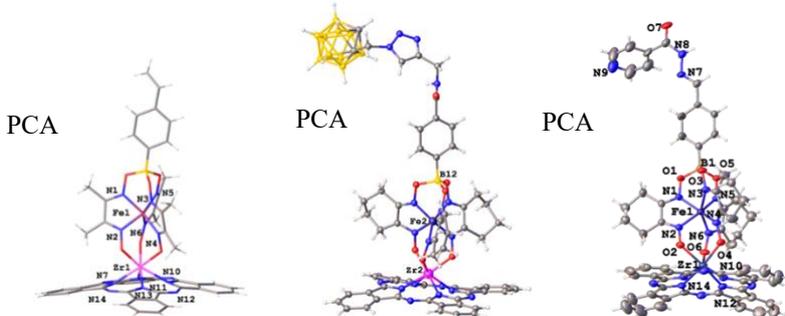
3. V.G. Kohn, M.S. Folomeshkin, *J. Synchrotron Rad.*, 2021, 28, p. 419-428.

НОВЫЕ ТИПЫ БИОЭФФЕКТОРОВ, ОПТИЧЕСКИХ И ПАРАМАГНИТНЫХ МЕТОК, МАГНИТНЫХ И МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КЛЕТОЧНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ: МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН И СИНХРОТРОННЫЕ РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

А.С. Чуприн, С.В. Дудкин, Я.З. Волошин

Институт элементоорганических соединений им.А.Н.Несмеянова РАН,
119991, Россия, г. Москва, ул. Вавилова, 28, стр.1
alschuprin@gmail.com

Макрополициклические комплексы металлов (клатрохелаты[1]) и их гибридные производные [2–4] с терминальными реакционноспособными и биорелевантными векторными группами (рис.) являются перспективными молекулярными платформами для разработки современных функциональных магнитных и металлополимерных материалов, «топологических лекарств», а также для новых типов биомиметической оптических и магнитных меток для структурной биологии и МРТ.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-23-00765).

Литература

1. Y.Z. Voloshin, I.G. Belaya, R. Krämer, Cage metal complexes: clathrochelates revisited, Springer, 2017. [Я.З. Волошин, И.Г. Белая, Р. Кремер, Клеточные комплексы металлов: клатрохелаты возвращаются, «Граница», 2018]
2. S.V. Dudkin, A.S. Chuprin, Y.Z. Voloshin, Dalton Trans. 2022, 51, 5645
3. A.S. Chuprin, S.V. Dudkin, Y.Z. Voloshin New J. Chem. 2022, 46, 10863
4. A.S. Chuprin, S.V. Dudkin, Y.Z. Voloshin, Dalton Trans. 2023, 10.1039/d3dt00076a

Секция 3.
Новые материалы и технологии

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ДИПОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ C₆₀F₁₈ НА ПОВЕРХНОСТИ

А.А. Андреев, Р.Г. Чумаков*

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
кафедра оптики спектроскопии и физики наносистем,
Andreev_artik@mail.ru
* НИЦ «Курчатовский институт»

Один из способов дальнейшей миниатюризации элементов микроэлектроники является использование молекул в качестве активных элементов логических схем. Поэтому поиск молекул-кандидатов для использования в молекулярной электронике, а исследование процессов взаимодействия молекул с различными подложками и электродами является актуальной задачей. Ранее для дипольных молекул C₆₀F₁₈ был проведен анализ адсорбции и самоорганизации на металлических поверхностях [1], [2]. Однако поведение данных молекул на диэлектриках поверхностях остается актуальной задачей.

Методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) было проведено исследование фундаментальных физико-химических явлений, происходящих при адсорбции дипольных молекул фторида фуллерена C₆₀F₁₈ на диэлектрических поверхностях оксида кремния SiO₂/Si(111) и германия GeO₂/Ge(110). Создание образцов тонких пленок молекул C₆₀F₁₈ проводилось методом молекулярно-пучковой эпитаксии в сверхвысоковакуумных условиях.

В ходе работы были определены типы адсорбции дипольных молекул и характер их самоорганизации на поверхностях в зависимости от материала подложки, что важно для создания элементов молекулярной электроники.

Литература.

1. A. I. Oreshkin et al., “Real-time decay of fluorinated fullerene molecules on Cu(001) surface controlled by initial coverage”, Nano Res., pp. 1–14, Sep. 2017.
2. Bairagi K. et al., “STM study of C₆₀F₁₈ high dipole moment molecules on Au(111)”. Surface Science, 641(2015), 248 – 251

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ГОМОГЕНИЗАЦИОННОГО ОТЖИГА ПОКОВОК ДЛЯ ИЗДЕЛИЙ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Ж.Э. Апинов

НИЦ Курчатовский Институт, jamarinov@yandex.ru
ЦНИИ КМ «Прометей»

В настоящее время возрастает потребность в изготовлении новых водо-водяных реакторов большой мощности для атомных энергетических станций [1-3].

Было установлено, что увеличение длительности нагрева в кузнечных печах перед I и II выносами приводят к повышению прочности и вязкопластических свойств, что связано со снижением химической и структурной неоднородностью слитков и поковок вызванных зональной и дендритной ликвацией за счет проведения гомогенизационного отжига.

Были исследованы поковки из стали аустенитного класса марки 08X18H10T массой от 8 до 63т, используемых во внутрикорпусных устройствах.

Анализ технологии выплавки иковки показал, что даже если не допущены отступления от технологии при проведении свободнойковки поковок из стали марки 08X18H10T, на их поверхности могут возникать трещины из-за недостаточной длительности гомогенизационного отжига. Для устранения трещинообразования был проведен анализ по длительности гомогенизационного отжига перед I и II выносом.

Установлено, что для поковок из слитков массой от 8,5 до 10,0 т максимальное количество трещин образуется на операции «осадка», когда возникают значительные растягивающие напряжения на поверхности поковок. Для слитков большой массы (13,3 и 63,0т) трещины возникают также на операции биллетировки. Разработанная новая технологияковки крупных поковок из сталей аустенитного класса марки 08X18H10T, за счет гомогенизационного отжига с суммарной удельной выдержки при температуре 1180-1200°Сравной 2,2 - 2,4 мин/мм сечения может обеспечить высокое качествоковки без трещинообразования.

Одними из элементов атомных энергетических установок являются также корпусные детали атомного реактора, изготовленные из стали бейнитного класса марки 15X2МФА-А[4].

Исследовано влияние длительности гомогенизационного отжига на критическую температуру хрупкости корпусной реакторной стали марки 15Х2МФА-А. Определен критерий расчета длительности гомогенизационного отжига– суммарная длительность нагрева слитка и поковки перед первым и вторым выносами. Показано, что при нагреве слитков и поволок перед первым и вторым выносами для достижения $T_{к0}$ не менее минус 50°С требуется суммарная удельная выдержка при температуре $1220 \pm 20^\circ\text{C}$ не менее 2,5 мин/мм сечения.

Литература.

1. Стали и сплавы энергетического оборудования. Справочник / Под ред. С.Б. Рыжова – М.: Машиностроение, 2008. – 960с.
2. Бескоровайный Н.М., Калинин Б.А., Платонов П.А., Чернов И.И. Конструкционные материалы ядерных реакторов: Учебник для вузов. – М.: Энергоатомиздат, 1995. – 704с.
3. Азбукин В.Г., Горынин В.И., Павлов В.Н. Перспективные коррозионно-стойкие материалы для оборудования и трубопроводов АЭС. – СПб.: ЦНИИ КМ «Прометей», 1997. – 118с.
4. Марочник сталей и сплавов. Изд. 2-е // А.С. Зубченко, М.М. Колосков, Ю.В. Каширский и др. / Под общей ред. А.С. Зубченко. – М.: Машиностроение, 2003. – 784с.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ МАНИПУЛЯЦИЯ МИКРО И НАНО ЧАСТИЦАМИ С ПОМОЩЬЮ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МИКРОПРОВОДОВ

А.В. Беклемишева, Л.В. Панина*

НИЦ Курчатовский Институт, annabekl@ya.ru

* Национальный исследовательский технологический университет
"МИСиС"

Ферромагнитные системы, состоящие из аморфных ферромагнитных микропроводов, имеют высокий потенциал для применения в биоинженерных и медицинских исследованиях. Сенсорные элементы на основе МИ в микропроводах обладают высокой чувствительностью, при этом детектирование выходного сигнала основано на хорошо разработанных методах с использованием высокочастотных схем. Манипуляторы на основе микропроводов позволяют реализовать градиенты магнитного поля на уровне 10^3 – 10^5 Тл/м, что достаточно для преодоления воздействия других сил (гравитации, вязкости, и т.д.), то есть для эффективного управления магнитными частицами: пара и диамагнитными (например, клетками).

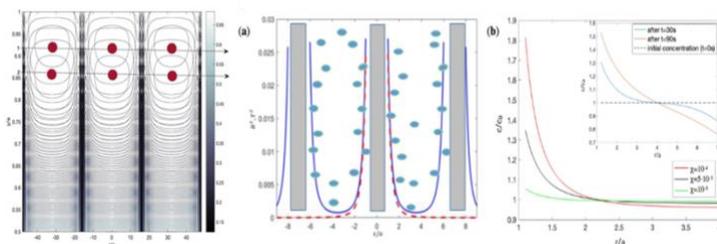


Рисунок (1) - Кривые эквипотенциальной плотности энергии $U+U_g$ в координатах (y, z) при $x = 0$ для периодической системы микропроводов. Высота левитации увеличивается при наличии намагничивающего поля 0,1 Тл." (2) Стационарное распределение концентрации c/c_0 (нормированное к исходной концентрации c_0) вокруг микропровода при различных значениях магнитной восприимчивости.

Литература.

1. Panina L.V., Gurevich A., Beklemisheva A., Omelyanchik A., Levada K., Rodionova V. Spatial Manipulation of Particles and Cells at Micro-and Nanoscale via Magnetic Forces Cells. 2022. 11.950.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ПУШКИ ДЛЯ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

А.В. Глинский, А.В. Нехорошев, Х.М. Козырев, А.Л. Гончаров

Национальный исследовательский университет "МЭИ",
GlinskyAV@mpei.ru

Большинство технологий электронно-лучевого аддитивного формообразования в настоящее время реализуются на отечественных комплексах, предназначенных для сварки, которые дооснащаются механизмом подачи проволоки. Вместе с тем, существует потребность в разработке конструкции специализированной наплавочной головки для реализации таких технологий.

В данной работе рассчитана новая конструкция электронной пушки, которая предназначена для послойного аддитивного формообразования из проволоки. Проведен расчет ускоряющего промежутка, при котором были оптимизированы параметры управляющего электрода. Была получена унифицированная форма управляющего электрода для пушек мощностью 5 и 10 кВт, обеспечивающая минимальный размер кроссовера пучка 120 мкм (рисунок 1). Для фокусировки пучка в области обработки предложено использовать совмещенную фокусирующе-отклоняющую магнитную систему, для которой определены ее основные геометрические и электрические параметры.

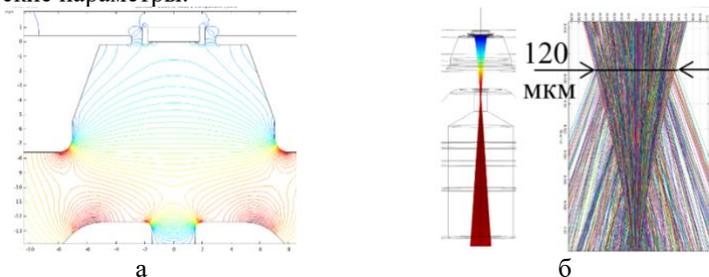


Рисунок 1 – Распределение электрического поля (а) и траектории электронов пучка (б) в ускоряющем промежутке электронной пушки

Работа выполнена в НИУ «МЭИ» при выполнении НИОКР в рамках ПНИ «Приоритет 2030: Технологии будущего» на период 2022/24 гг., номер проекта пни 2022/24 -37.

ВЛИЯНИЕ СМЕШАННОГО ПРОТОННО-КИСЛОРОДНОГО ОБЛУЧЕНИЯ И ПОСЛЕДУЮЩЕГО ОТЖИГА НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЁНОК NbN

Г.Ю. Голубев, К. Е. Приходько

НИЦ Курчатовский Институт, geolubev@gmail.com

В докладе представлен краткий обзор современных исследований механизма изменения свойств тонких плёнок NbN под облучением смешанным ионным пучком.

Представлены результаты измерений критической температуры и токов сверхпроводящего перехода для плёнок NbN толщиной 5.5 нм, облучённых смешанным ионным пучком разных флюенсов.

Экспериментально изучены особенности влияния стабилизирующего отжига на изменение сверхпроводящих свойств облучённых плёнок, а также на их свойства в нормальном состоянии.

Литература

1. Dement'eva M.M., Prikhod'ko K.E., Gurovich B.A. et al. Study of the evolution of the atomic composition of thin NbN films under irradiation with mixed ion beams by methods of electron energy loss spectroscopy // Phys. Solid State. 2016. Т. 58, № 11
2. Гурович Б.А., Приходько К.Е., Гончаров Б.В., Дементьева М.М. и др. Влияние интегрированных сопротивлений, созданных под действием ионного облучения, на сверхпроводящие переходы нанопроводников из нитрида ниобия // Журнал технической физики, 2020, том 90, вып. 11
3. Приходько, К. Е. Разработка методов контролируемого преобразования атомного состава и свойств веществ под действием ионного облучения для создания функциональных наноустройств различного назначения. Автореф. дисс. д-р. физ.-мат. наук; спец. 01.04.01 / Приходько Кирилл Евгеньевич. Москва: НИЦ КИ, 2016. – 48 с.

ПРЯМОЕ ЛАЗЕРНОЕ ВЫРАЩИВАНИЕ ОБЪЕМНЫХ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ ИЗ СПЛАВА
ZR35TI30VE27.5CU7.5

Д.С. Горбунов, А.Н. Сучков, Е.А. Баздникина, О.Н. Севрюков,
В.Н. Петровский, Э.Д. Ишкиняев

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"
dima07gorbunov@gmail.com

Объёмные аморфные металлические сплавы на основе циркония являются перспективными материалами для применения в различных отраслях промышленности благодаря их уникальным механическим и физико-химическим свойствам [1]. Решение проблемы получения аморфных изделий без ограничения их форм и размеров представляется в использовании технологий 3D-печати. Прямое лазерное выращивание (*DED – direct energy deposition*) является одним из наиболее распространенных видов аддитивного производства благодаря высокой скорости печати, толерантности к разным типам порошков и отсутствию пористости у получаемых изделий [2].

В данной работе исследована возможность получения объёмных изделий с аморфной или аморфно-кристаллической структурой методом DED из металлического порошка осколочного типа фракции 40–100 мкм сплава $Zr_{35}Ti_{30}Ve_{27.5}Cu_{7.5}$ (ат. %). Апробирование проводилось по 7 режимам с варьированием мощности лазерного луча (150–160 Вт), шагов по горизонтали (0,5–1,5 мм) и вертикали (0,15–0,25 мм) и задержки по времени (0–3 сек). Для всех режимов скорость печати 1000 мм/мин, диаметр пятна излучения лазера 400 мкм, подача порошка 1–2 г/мин.

По результатам исследования СФС сделан вывод о формировании аморфно-кристаллической структуры в ходе получения изделий методом DED. Наибольшая степень аморфности наблюдалась у образца, напечатанного по следующему режиму: мощность 150 Вт, шаг по горизонтали 1,5 мм, по вертикали – 0,25 мм, задержка шага по вертикали 3 сек.

Литература.

1. Greer, A.L., Ma, E. Bulk Metallic Glasses: At the Cutting Edge of Metals Research. MRS Bulletin 32, 611–619 (2007).

2. Аддитивные технологии в машиностроении / Зленко М.А., М.В. Нагайцев, В. М. Довбыш. – М.: ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ». – 2015. – 220 с.

НАПЫЛЕНИЕ ИЗНОСОСТОЙКИХ ПОКРЫТИЙ ИЗ ПЛАКИРОВАННЫХ ПОРОШКОВ СИСТЕМ TiB_2/Ti и HfB_2/Ti И СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ

М.Е. Гошкодера, Т.И. Бобкова, С.П. Богданов*

НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ
«Прометей», mail@crism.ru

* Санкт-Петербургский государственный технологический институт

В работе представлены результаты по синтезу композиционных плакированных порошковых систем с типом строения «ядро-оболочка» для напыления износостойких металлокерамических покрытий [1]. В качестве ядра, для синтеза композиционного порошка, были использованы порошки высокотвердых боридов TiB_2 и HfB_2 , а для создания оболочки на их поверхности – титан. Синтез плакирующего слоя осуществляли йодотранспортным методом [2]. Напыление синтезированных порошков систем TiB_2/Ti и HfB_2/Ti осуществляли микроплазменным методом [3]. В процессе микроплазменного напыления титан в композиционных порошках насыщается кислородом, образуя фазу диоксида титана, таким образом, изменяются фазовый состав и конфигурация плакированных композиционных порошков и формируются покрытия составов $TiB_2(TiB)/Ti(TiO_2)$ и $HfB_2/Ti(TiO_2)$. Исследования твердости показали, что у покрытий на основе диборида титана интегральное значение микротвердости составляет 1300 HV. У покрытий на основе диборида гафния интегральная микротвердость составила порядка 1600 HV. При исследовании износостойкости сопрягались пары с покрытиями $TiB_2(TiB)/Ti(TiO_2)$ и $HfB_2/Ti(TiO_2)$ с контртелом образца из стали 45X без покрытия и совместно друг с другом. Не смотря на менее высокую микротвердость, наиболее износостойким является покрытие системы $TiB_2(TiB)/Ti(TiO_2)$.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ, проект №21-73-30019.

Литература

1. Герасимова Н.С. Основные виды композиционных материалов и керамики // Учебное пособие, КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2019. – 32 с.
2. Богданов С.П. Йодотранспортный метод получения покрытий на порошках // Известия Санкт-Петербург. государственного техн. инст., Химия и химическая технология, Технология неорганических веществ, 2012, 16 (42), с. 24-28.

3. Goshkoderya M.E., Bobkova T.I., Staritsyn M.V. Investigation of Ti/TiB₂ System Composite Coatings Sprayed by Microplasma Method // Journal of Physics: Conference Series, 2022, 2182(1), 012073

ИЗМЕНЕНИЕ ПРОЧНОСТИ ТРУБОПРОВОДОВ АЭС ИЗ-ЗА ДЕФЕКТОВ «ПОТЕРИ МЕТАЛЛА»

Гусаров А.Е. а, serg-rncki@rambler.ru, Сергеева Л.В. а,*

^аНИЦ «Курчатовский институт»,
^{*}НИЦ «Московский авиационный институт»

Рассмотрены вопросы компьютерного моделирования дефектов потери металла в элементах трубопроводов АЭС. Приведены некоторые результаты прочностных расчетов методом конечных элементов для адаптеров трубопроводов, получивших локальные утонения. В процессе эксплуатации трубопроводов АЭС, общая длина которых достигает нескольких километров, а продолжительность работы равна 60 годам, не могут не возникать дефекты, которые проявляются, как локальные и равномерные утонения стенок из-за процесса эрозионно-коррозионного износа, а также трещины самого разнообразного происхождения. Эти процессы обусловлены экстремальными условиями эксплуатации. Полностью устранить процессы деградации металла при таких условиях невозможно, однако, вскрыв основные закономерности, их можно существенно затормозить.

ТЕХНОЛОГИЯ ГЕНЕРАЦИИ ЭЛЕКТРОЭНЕРГИИ НА ОСНОВЕ ПЬЕЗОПЛЕНКИ ИЗ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА МАРКИ Ф-2МЭ ДЛЯ ГИДРОАКУСТИЧЕСКИХ СРЕДСТВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭНЕРГИИ ВОЛНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ МОРЯ

И.И. Дементьев, В.А. Шабанов

Акционерное общество «Концерн «Океанприбор», mail@oceanpribor.ru

Тенденции развития гидроакустической техники требуют создания мощных автономных электрогенерирующих устройств (ЭГУ). При этом увеличение количества генерирующих элементов приводит к увеличению массы устройств. С другой стороны, для автономного снабжения гидроакустических средств электроэнергией в условиях акваторий с использованием волнения поверхности моря является недопустимым превышение пороговых уровней по массе.

Одним из направлений решения поставленной проблемы является создание генераторов на основе пленок из поливинилиденфторида (ПВДФ), например, марки Ф-2МЭ. Применение сравнительно низкоплотного пленочного материала из ПВДФ позволяет создавать выгодные в массовом отношении эффективные электрогенераторы.

Результаты исследований [1, 2] показали, что чувствительность преобразователей, при рациональной схеме их механического нагружения, составляет 460 мкВ/Па при абсолютной диэлектрической проницаемости $115,05 \cdot 10^{-12}$ Ф/м, а величина эффективного пьезоэлектрического модуля соответствует 35,08 пКл/Н, что подтверждает целесообразность разработки технологии построения ЭГУ на основе пленок из ПВДФ для гидроакустической техники.

Литература.

1. Дементьев И.И., Шабанов В.А., Шабанова Н.С. Методика расчета чувствительности пленочного пьезоэлектрического преобразователя гидроакустической антенны / Тр. Всерос. конф. «Прикладные технологии гидроакустики и гидрофизики». СПб., 2023. С. 194-199.
2. Дементьев И.И., Шабанов В.А., Шабанова Н.С. Подход к математическому моделированию пленочных анизотропных конструкций электроакустических преобразователей / Науч.-техн. сб. «Гидроакустика / Hydroacoustics». 2022. Вып. 51(3). С. 42-49.

НОВЫЕ КРАСНОИЗЛУЧАЮЩИЕ ЛЮМИНОФОРЫ НА ОСНОВЕ Ba-СОДЕРЖАЩИХ БОРАТОВ Bi И РЕДКИХ ЗЕМЕЛЬ

С.В. Демина*,**, А.П. Шаблинский*, Р.С. Бубнова*, А.В.
Поволоцкий***, С.К. Филатов**

*Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова, РАН,
Санкт-Петербург, Россия

**Институт наук о Земле СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

***Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время актуальной проблемой является разработка новых оптических материалов-люминофоров для применения в источниках городского освещения, производства LED панелей, таможенного контроля и др. приложений.

Поскольку одним из важных критериев выбора фотолюминофора является его термическая стабильность вследствие того, что при нанесении слоя на кристалл его температура может достигать более 150°C, к исследуемым материалам предъявляется требование достижения термической стабильности. Поэтому в работе также изучены и термические свойства материала (термическое расширение, процессы порядок-беспорядок и термическое тушение фотолюминесценции), и выявлены закономерности «состав-структура-свойство».

Впервые получены перспективные концентрационные серии твердых растворов $Ba_3Y_{2-x}Eu_x(BO_3)_4$, $BaBi_{2-x}Eu_xB_2O_7$, $BaBi_{2-x}Sm_xB_2O_7$, $BaBi_{2-x-y}Eu_xSm_yB_2O_7$, изучено термическое поведение $Ba_3Eu_2(BO_3)_4$. На основе боратов $Ba_3Y_{2-x}Eu_x(BO_3)_4$ получены перспективные люминесцентные термометры, изучено перераспределение катионов по позициям с повышением температуры [1]. Получены перспективные настраиваемые красноизлучающие люминофоры $BaBi_{2-x}Eu_xB_2O_7$, рассмотрена корреляция между кристаллической структурой и оптическими свойствами [2]. Проведено содопирование по формуле $BaBi_{2-x-y}Eu_xSm_yB_2O_7$ с целью повышения эффективности люминесценции. Планируется также получение перспективных настраиваемых люминофоров на основе боратов $BaBi_{2-x}Tb_xB_2O_7$ и дальнейшее проведение содопирования ионами Eu^{3+} .
Литература.

1. S.V. Demina, et al., *Ceram. Int.*, 2023, p.6459-6469.

2. A.P. Shablinskii, et al., *J. of Sol. St. Chem.*, 2022, p.122837.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ И СТЕКЛОКЕРАМИЧЕСКИЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ АВИАЦИОННОЙ И АТОМНОЙ ОТРАСЛЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

В.С. Денисова, И.О. Беляченков, О.В. Власова, Б.Ю. Кузнецов,
М.В. Турченко

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов»
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
e-mail: admin@viam.ru

НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ проводит исследования в области разработки высокотемпературных керамических композиционных материалов (ККМ) и защитных покрытий нового поколения, а также технологий изготовления элементов конструкций из них с применением инновационных методов, в том числе аддитивных технологий (АТ).

С применением одного из наиболее перспективных методов консолидации тугоплавких соединений - искрового плазменного спекания (spark plasma sintering (SPS)), разработан ряд ККМ с высокой термостойкостью и прочностью при изгибе выше 400 МПа. Проводятся исследования по получению бездефектных изделий из реакционно-спеченного карбида кремния с регулируемым фазовым составом с применением рентгеновского неразрушающего контроля.

Ведутся исследования по разработке компонентов для получения ККМ с применением аддитивных технологий, организован участок полного цикла получения керамики методом лазерной стереолитографии.

Создан научно-технический задел в области создания защитных покрытий, предохраняющих от окисления в процессе горячей деформации поверхность заготовок из сплавов циркония.

Разработано стеклокерамическое покрытие ВЭС-104М, обладающее высокой жаростойкостью и термостойкостью при температурах 1000-1150°C, и энергоэффективная технология его ремонта. Покрытие позволяет снизить окисляемость жаропрочных сплавов, повысить ресурс работы деталей в 1,5-2 раза по сравнению с эксплуатацией без покрытия. Высокий уровень защитных свойств обусловлен высокой прочностью ковалентных химических связей в покрытии, и как следствие, высокой тугоплавкостью, что обеспечивает стойкость к воздействию агрессивных сред при высоких температурах.

ФОРМИРОВАНИЕ ПЛАНАРНЫХ АНОДНЫХ НАНОСТРУКТУР NiO В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

Д.А. Дудорова 1,2, Ф.Ю.Горобцов1, Н.Т. Кузнецов 1 Т.Л. Симоненко 1, Н.П. Симоненко 1, Е.П.Симоненко 1

¹Институт общей и неорганической химии имени Н.С.

Курнакова, dudorowa.darya@yandex.ru

²Российский химико-технологический университет имени

Д.И. Менделеева, наноматериалы, dudorowa.darya@yandex.ru

Одной из наиболее актуальных задач современной энергетики является обеспечение ежегодно растущего мирового спроса на электроэнергию. С учётом истощения ископаемых энергетических ресурсов всё больше внимания научное сообщество во всём мире уделяет развитию альтернативных источников. При этом твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) планарного типа являются одним из наиболее перспективных типов подобных устройств, а их эффективность во многом зависит от микроструктурных особенностей электродных компонентов. Так, получение иерархически организованных анодных наноструктур NiO способствует формированию более развитой поверхности материала, что приводит к повышению энергоэффективности топливного элемента [1, 2]. Особенно удобным с этой точки зрения является гидротермальный метод: варьирование условий синтеза позволяет получать функциональные покрытия с варьируемыми микроструктурными характеристиками [3]. В рамках данной работы был изучен процесс выращивания иерархически организованных анодных наноструктур NiO в гидротермальных условиях, а также показано влияние условий синтеза на оптические и микроструктурные свойства получаемых материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-00288, <https://rscf.ru/project/21-73-00288/>.

Литература.

1. T.L. Simonenko, et al., Mater, 2022, vol. 15, p. 8918.
2. T.L. Simonenko, et al., Russ J Inorg Chem, 2022, vol. 67, p. 622-627.
- T.L. Simonenko, et al., Russ J Inorg Chem, 2020, vol 65, p. 1292-1297.

АПРОБАЦИЯ МЕТОДА СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ГИРОСКОПОВ

А.С. Жуков, Т.В. Князюк, П.А.Кузнецов

НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей»,
nprk3@crism.ru

Узкоспециализированная проблема изготовления бездефектных изделий из прецизионных сплавов весьма актуальна для нужд современного приборостроения. Наибольшее применение данные сплавы находят в гироскопах: для изготовления магнитного подвеса (сплав 25Х15К) и экрана корпуса (сплав 80НХС). Длительное время изготовление данных деталей технологически ограничивалось литьем и ковкой, при этом процент брака при производстве доходил до 50 [1]. С развитием аддитивных технологий появилась возможность изготовить данные изделия в размер без необходимости использования форм и механической обработки, при полном отсутствии внутренних дефектов и с сохранением магнитных свойств [2].

Распылением расплава были получены порошки прецизионных сплавов, удовлетворяющие требованиям для сплавления. Подобраны оптимальные режимы сплавления и изготовлены опытные образцы изделий, на которых измерены магнитные характеристики. Остаточная индукция для аддитивного образца из сплава 25Х15К составила 1,14 Тл, коэрцитивная сила – 41,9 кА/м, максимальное энергетическое произведение – 32,2 кДж/м³. Для сплава 80НХС после термообработки максимальная магнитная проницаемость составила 33200 Гс/Э. Данные магнитные свойства сопоставимы со свойствами образцов, полученных традиционными металлургическими технологиями. Структурные исследования показали полное отсутствие дефектов: раковин, засоров, трещин. По результатам исследований были изготовлены опытные образцы изделий из прецизионных сплавов, которые найдут свое применение в гироскопах производства АО «Спецмагнит» и АО «Концерн «ЦНИИ «Электроприбор».

Литература.

1. Пельпори др. Динамически настраиваемые гироскопы: теория и конструкция М.: Машиностроение, 1988, с. 263.
2. J. Sedlak, et al., *Procedia Engineering*, 2015, p. 1232-1241.

НОВЫЕ КРЕМНЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ
ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ
[1]БЕНЗОТИЕНО[3,2-В][1]БЕНЗОТИОФЕНОВЫМИ
ФРАГМЕНТАМИ

Е. А. Заборин, О. В. Борщев, В. В. Городов, М. С. Полинская, С. А.
Пономаренко, М. С. Скоротецкий

Институт синтетических полимерных материалов имени
Н.С.Ениколопова РАН, Москва, Россия
E-mail: zaborin@ispm.ru

Органические полупроводники являются актуальным предметом исследований преимущественно благодаря своим уникальным электрическим и оптическим свойствам, которые включают в себя высокую растворимость во многих органических растворителях, гибкостью устройств на их основе и низкой стоимостью технологии их получения, и находят применение во органических полевых транзисторах (ОПТ), органических светодиодах (ОСД), биосенсорах, органических солнечных батареях (ОСБ) и др. [1]

[1]Бензотиено[3,2-б][1]бензотиофен (ВТbТ) и его производные – одни из наиболее эффективных органических полупроводников являются используемых в ОПТ [2], фототранзисторах. [3]

В настоящей работе представлены данные о синтезе и свойствах новых кремнийорганических полимеров, модифицированных диалкилпроизводными ВТbТ. Полученные полимеры исследованы методами термогравиметрического и дифференциально-калориметрического анализа. Их фазовое поведение изучено методом поляризационно-оптической микроскопии. [4]

Работа была проведена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-73-30028).

Литература

1. Sizov A.S., Agina E.V., Ponomarenko S.A. Russ. Chem. Rev. 2018. V. 87 № 12. P. 1226-1264.
2. Ebata H., et al. J. Am. Chem. Soc. 2007. V. 129. № 51. P. 15732-15733.
3. Zhang M., et al. Electron Device Letters. 2021. vol. 42. № 7. P. 998-1001.
4. Zaborin, E.A., Borshchev, O.V., Skorotetskii, M.S. et al. Polym. Sci. Ser. B 64, 841–854 (2022).

ВЛИЯНИЕ СВЧ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА МЕЖСЛОЕВУЮ ПРОЧНОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

И.В. Злобина^{1,2}, Н.В. Бекренев², А.С. Егоров¹, Т.М. Алукаев²

¹НИЦ Курчатовский Институт, zlobinaiv@sstu.ru

²СГТУ имени Гагарина Ю.А.

Воздействие СВЧ электромагнитного поля на отвержденные ПКМ способствует увеличению предельных напряжений межслоевого сдвига угле- стекло- и органопластика в среднем на; 9,6-16,3 %. Плотность потока энергии влияет на напряжения в углепластике в значительно большей степени по сравнению другими материалами. Это может быть связано с тем, что нагрев углепластика сопровождается скин-эффектом на поверхности проводящих волокон, вызывающем интенсивный рост температуры в межслоевом и межслоевом пространстве ПКМ [1-4].

Результаты исследования удельной работы расслоения тех же групп образцов показало увеличение численных значений данной характеристики на 12-20 %, что удовлетворительно коррелирует с увеличением прочности данных материалов при трехточечном изгибе и межслоевом сдвиге [5-6].

Литература.

1. Дориомедов М.С., Труды ВИАМ 6-7, с. 29-37 (2001).
2. Михайлин Ю.А. Конструкционные полимерные композиционные материалы. 2-е изд. СПб., Научные основы и технологии, 2010, 822 с.
3. Jing Zhou, Yingguang Li, Mengchen Zhang at al., Materials Today Communications 26 101960 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101960>
4. Kim T., Jaegeun L., Kun-Hong L., Carbon Letters.15, 1, p. 15-24 (2014).
5. И.В. Злобина, К.С. Бодягина, С.П. Павлов, Н.В. Бекренев, Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева. Серия: Механика предельного состояния, № 4, с. 34-48 (2018).
6. Zlobina I.V., Bekrenev N.V., Muldasheva G.K., Materials Science Forum, 992, p. 317-324 (2020).

СПЕКТРОСКОПИЯ МНОГОКРАТНЫХ АНДРЕЕВСКИХ
ОТРАЖЕНИЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СЕЛЕНИДА (K,Na)Fe₂Se₂

А.Д. Ильина 1,2,А.И. Болталин³, Т.Е. Кузьмичева¹, С.А. Кузьмичев^{3,1},
В.М. Михайлов^{1,2}, И.В. Морозов³, И.А. Никитченков³,
А.И. Шилов^{3,1}

¹ Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия.

² МФТИ, Долгопрудный, Россия, anastasiailina2802@gmail.com

³ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Соединение (K,Na)Fe₂Se₂ переходит в сверхпроводящее (СП) состояние при критической температуре $T_c = 31$ К. Слоистые монокристаллы (K,Na)Fe₂Se₂ обладают естественным фазовым расслоением: в них сосуществуют как минимум три фазы (СП, металлическая и диэлектрическая); объёмная доля СП фазы в среднем составляет 10-15% [2].

В исследованных монокристаллах (K,Na)Fe₂Se₂ при $T = 4.2$ К с помощью техники «break-junction» [1]) создавались контакты сверхпроводник-нормальный металл-сверхпроводник (SnS), в которых наблюдался эффект некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE). Эффект вызывает появление серии щелевых особенностей – субгармонической щелевой структуры (СГС) при $eV = 2\Delta(T)/n$ ($\Delta(T)$ – амплитуда СП щели, n – натуральное число) при любых температурах вплоть до T_c [3].

На $dI(V)/dV$ -спектрах SnS-контактов при $T \ll T_c$ наблюдалось до $n = 4$ минимумов СГС. Мы вычислили $\Delta(0) \approx 5.4 \pm 0.2$ мэВ и ее характеристическое отношение $2\Delta(0)/k_B T_c = 3.98$, а также величину предположительной малой СП щели Δ_S . Мы показали, что температурные зависимости проявлений IMARE-транспорта могут быть аппроксимированы на основе однозонной и двухзонной модели. Литература.

1. Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е //ФНТ, 2016,т.42, № 11, с. 1284.

2. Krzton-Maziopa A // Front.Chem. 2021. 9:640361.

doi:10.3389/fchem.2021.640361

3. KuemmelR.//Phys. Rev. B 1990.Vol. 42 P. 3992.

МЕТАЛЛОВЕДЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРОИЗВОДСТВА МАЛОГАБАРИТНЫХ ШТАМПОВОК ДИСКОВ ИЗ НИКЕЛЕВОГО ЖАРОПРОЧНОГО СПЛАВА МЕТОДОМ ГОРЯЧЕЙ ДЕФОРМАЦИИ

М.М. Карашаев, Д.В. Капитаненко, А.С. Шпагин, Е.С. Елютин

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов»
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
105005, Москва, ул. Радио, 17

mkarashaev16@mail.ru

Основной проблемой при термомеханической обработке заготовок дисков из высоколегированных никелевых жаропрочных сплавов (НЖС) является низкая технологическая пластичность, связанная с повышением сопротивления деформации сплава в двухфазной ($\gamma + \gamma'$)-области.

В связи с этим, важно обеспечить такие условия термомеханической обработки, при которых будут установлены условия равновесия между процессами упрочнения и разупрочнения. Таких условий достигают с применением метода изотермической деформации, обеспечивающего возможность поддержания температуры и скорости в оптимальных узких диапазонах в процессе всего цикла формоизменения заготовки.

Целью работы являлось определение оптимальных условий термомеханической и термической обработки малогабаритных НЖС марки ВЖ179, обеспечивающих оптимальную технологическую пластичность и комплекс механических характеристик малогабаритных штамповок дисков, соответствующие требованиям технических условий (ТУ).

Температуры фазовых превращений ($T_{\gamma'}$, T_S , T_{MC} , T_L) определяли методом дифференциально-термического анализа на установке Linseis HDSC PT 1750 .

Математическое моделирование процесса деформации малогабаритных штамповок дисков проводили в программном комплексе Qform-3D с помощью метода конечных элементов.

Для определения оптимальных параметров термомеханической обработки штамповок проводили осадку лабораторных образцов на гидравлическом прессе с усилием 63 тс. В качестве образцов использовали цилиндрические заготовки диаметром

15 мм и высотой 20 мм. Деформацию осуществляли сжатием на плоских бойках при различных температурах и скоростях деформации после предварительного нагрева и выдержки в течение 60 мин.

Деформацию малогабаритных штамповок дисков проводили методом изотермической деформации на воздухе на гидравлическом прессе с усилием 1600 тс, оснащённом специальной индукционной установкой УИДИН-500 для нагрева штампового инструмента. Для выбора оптимальных температурно-временных параметров термической обработки было исследовано влияние температуры и времени обработки на размер зёрен γ -твёрдого раствора и количество упрочняющей γ' -фазы.

По результатам проведенных исследований были выбраны оптимальные температурно-силовые и температурно-временные параметры процессов термомеханической и термической обработки и получены опытные образцы штамповок дисков. Для оценки качества разработанной технологии изотермической деформации были проведены исследования структуры и свойств полученных штамповок.

Было установлено, что макроструктура заготовок по всему сечению однородная, без видимых деформационных дефектов или резко выраженных линий интенсивного течения металла. Микроструктура образцов, вырезанных из разных частей штамповок после термической обработки состояла из однородно распределённых по всему объёму частиц упрочняющей γ' -фазы и зёрен γ -твёрдого раствора.

Механические характеристики штамповок, полученных по выбранным режимам термомеханической и термической обработки, соответствовали требованиям ТУ.

УСКОРЕННЫЕ И НАТУРНЫЕ ИСПЫТАНИЯ ЛАКОКРАСОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ

А.М. Коган, В.О. Старцев

НИЦ Курчатовский Институт - ВИАМ, alekseikogan@yandex.ru

Лакокрасочные покрытия (ЛКП) в процессе эксплуатации подвергаются воздействию различных климатических факторов (ультрафиолетовое излучение, эрозионное воздействие переменной температура, коррозионные среды, и т. д.), которые в конечном итоге определяют срок службы ЛКП, т. е. сохранение их защитных и декоративных свойств [1, 2]. В этой связи данный доклад призван, с одной стороны собрать эмпирические данные об особенностях влияния на декоративные свойства покрытий в двух климатических зонах: умеренного и умеренного с мягкой зимой. А с другой – на основании полученных данных иметь возможность моделировать условия конкретного климатического района. Для формирования экспериментальной базы были проведены натурные климатические испытания двух типов эмалей, нанесенных на алюминиевые пластины Д16АТ – фторполиуретановой и эпоксидной с двумя типами пигментов: красным и серым [3]. Ежедневные измерения параметров блеска и цвета ЛКП показали, что наиболее подверженной к воздействию солнечного излучения из эмалей в умеренном климате с мягкой зимой является эпоксидная эмаль ($\Delta E=11.4$ у.е.), а из пигментов – красный. Наименьшее значение изменения цвета после натурных испытаний принадлежит фторполиуретановой эмали с серым пигментом и составляет 0.86 у.е. Для умеренного климата результаты имеют схожий вид, наибольшее значение изменения цвета также принадлежит эпоксидной эмали с красным пигментом, однако в силу меньшего количества солнечных дней составляет 7.67 у.е., у фторполиуретановой эмали $\Delta E=0,65$ у.е. Адгезия ЛКП к поверхности на каждом промежутке времени составляла 0 баллов по ГОСТ 31149-2014 (отслоений нет). Результаты лабораторных ускоренных климатических испытаний коррелируют с натурными [4].

Литература.

1. Каблов Е.Н., Старцев О.В., Кротов А.С., Кириллов В.Н. Климатическое старение композиционных материалов авиационного назначения. I. Механизмы старения //Деформация и разрушение материалов. 2010. №11. С. 19–27.

2. Каблов Е.Н., Старцев О.В., Кротов А.С., Кириллов В.Н. Климатическое старение композиционных материалов авиационного назначения. III. Значимые факторы старения. Деформация и разрушение материалов. 2011. №1. С. 34–40.
3. Кондрашов Э.К., Кузнецова В.А., Семенова Л.В., Лебедева Т.А. Основные направления повышения эксплуатационных, технологических и экологических характеристик лакокрасочных покрытий для авиационной техники //Российский химический журнал. 2010. Т. LIV. №1. С. 96–102.
4. А.М. Коган, В.О. Старцев Климатические испытания лакокрасочных покрытий // Физико-механические испытания, прочность и надежность современных конструкционных и функциональных материалов: материалы XIV Всероссийской конференции по испытаниям и исследованиям свойств материалов «ТестМат»). - М.: НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ, 2022. - С. 284-296.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА КАК ВЫСОКОЭФФЕКТИВНАЯ ЗАМЕНА ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОЙ СТАЛИ

А.О. Ларин, Г.С. Римский

ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», new_a-larin@mail.ru

В последние годы интенсивно проводятся исследования магнитно-мягких композиционных материалов (SMC), основанных на использовании магнитно-мягких частиц, обычно на основе железа, с электроизолирующим покрытием на каждой частице [1]. Основное назначение SMC материала – это построение с его использованием высокоэффективных электродвигателей, трансформаторов, дросселей и других устройств [2]. В этой связи основные свойства композиционного материала, такие как магнитная проницаемость, магнитная индукция, потери на перемагничивание и механические свойства должны быть лучше, чем у традиционных ламинированных металлических магнитных материалов.

В нашем центре разработан метод синтеза новых высокоэффективных композиционных материалов, состоящих из железных частиц и наноразмерных изолирующих покрытий [3]. Полученные композиционные материалы, обладающие более низкими стоимостными параметрами и низкими потерями на перемагничивание, имеют существенные преимущества перед электротехнической сталью. С применением новых электротехнических материалов можно изготавливать высокоэффективные электродвигатели, генераторы, трансформаторы и другие электротехнические изделия.

Литература.

1. Bingyang Meng, Jixian Hou et al. Low-loss and high-induction Fe-based soft magnetic composites coated with magnetic insulating layers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2019, Vol. 492, 165651.
2. Grande M.A., Ferraris L., Francici F., Poskovic E. New SMC Material for Small Electric Machine. *IEEE Transaction on Industry Applications*, 2018, Vol.54, No.1, pp.195–203.
3. Govor G.A., Larin A.O. The Magnetic Properties of a Magnetically Soft Composite Material for Use in the Low-Frequency Range. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2019, Vol.10, No.2, pp.387–390.

НОВЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ МЕТА-СОПРЯЖЁННЫЕ ЛЮМИНОФОРЫ НА ОСНОВЕ 2,1,3-БЕНЗОТИАДИАЗОЛА С РАЗВЕТВЛЯЮЩИМ ЦЕНТРОМ 1,3,5-ЗАМЕЩЁННЫЙ БЕНЗОЛ

Л.Л.Левков^{1,2}, О.В. Борщев¹, Г.П. Гончарук¹, С.А. Пономаренко^{1,2},
Н.М. Сурин¹

¹Институт синтетических полимерных материалов РАН им. Н.С.
Ениколопова, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, кафедра высокомолекулярных соединений
Москва, Россия, E-mail: levkov.lev@yandex.ru

Органические люминофоры и полимерные люминесцентные материалы находят применение в химических сенсорах, оптоэлектронных устройствах, средствах регистрации ионизирующего излучения. Требованиями, предъявляемыми к красителям, используемых в средствах регистрации ионизирующего излучения являются высокие коэффициенты экстинкции и квантовые выходы фотолюминесценции, низкое самопоглощение люминесценции (малое перекрывание спектров поглощения и люминесценции) фотохимическая, радиационная и термическая устойчивость, совместимость с полимерной матрицей.

Нами разработаны красители-производные 2,1,3-бензотиадиазола с разветвляющим центром 1,3,5-замещённый бензол, обладающие коэффициентами экстинкции в среднем УФ-диапазоне более 5×10^4 лМ⁻¹см⁻¹, излучающие в сине-зеленой области и достаточно термически стабильные. Люминофор, у которого заместителями в мета-положениях ароматических ядер являются дифенилы (рис. 1 А), обладает и высоким квантовым выходом фотолюминесценции в органических растворителях. Поэтому выдвинуто предположение, что этот краситель в сцинтилляционных композициях на основе полистирола может выполнять роль как активатора радиолуминесценции, так и сместителя длины волны излучения.

В настоящей работе исследованы абсорбционные, фото- и радиолуминесцентные свойства двухкомпонентных композиций краситель (0.01-1 масс.%)–полистирол. Изученные материалы получены методом экструзионного смешения при температуре 180°C. Методами абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии установлены устойчивость красителя к агрегации и отсутствие

химических превращений при многократном термическом воздействии.

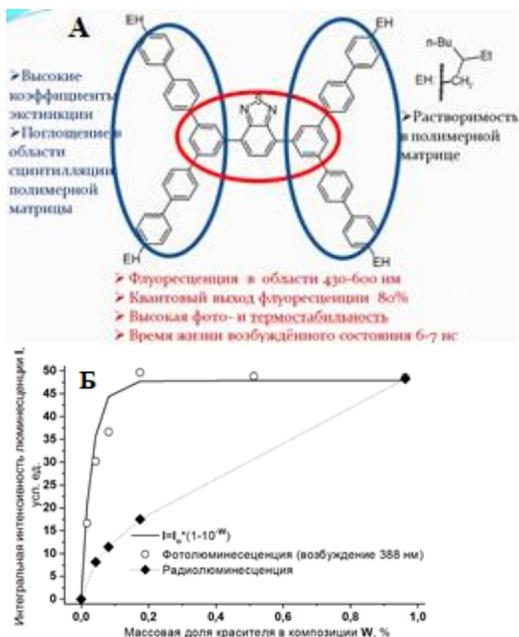


Рис. 1. **А** Структура красителя и функциональные свойства структурных фрагментов; **Б** Зависимости интенсивности фото- и радиолюминесценции пластин толщиной 1.5-1.7 мм от массовой доли красителя в композиции

Продемонстрирована возможность создания композиций, в которых один и тот же краситель выполняет роль как активатора радиолюминесценции, так сместителя излучения в видимую область. Показано, что оптимальным диапазоном концентраций люминофора в отношении интенсивности фотолюминесценции является 0.15-0.25 масс. %, а максимальная интенсивность радиолюминесценции наблюдается при концентрации 1% (Рис. 1 Б).

Работа выполнена при финансировании из средств гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ № НШ-3843.2022.1.3 с использованием приборной базы ЦКП ИСПМ РАН.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОЛУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА В СРЕДЕ АНИОНОГЕННЫХ ПАВ

Д.Г. Маглакелидзе, З.А. Рехман, А.В. Блинов, М.А. Тараванов,
А.А. Блинова

ФГАОУ-ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»,
ogonioc2015@mail.ru

Наночастицы селена находят свое применение в парфюмерно-косметической промышленности благодаря своим физико-химическим и антиоксидантным свойствам. В свою очередь, стабилизация подобных форм селена поверхностно-активными веществами (ПАВ) позволит более успешно внедрить наноматериал в средства парфюмерии [1].

Таким образом, ввиду перспективного применения данного материала, основной задачей работы стала разработка метода получения наночастиц селена в среде анионогенных ПАВ, как инновационного компонента для средств парфюмерно-косметической промышленности.

Синтез наночастиц селена осуществляли методом химического восстановления в водной среде при комнатной температуре [2,3]. В качестве селенсодержащего прекурсора использовали селенистую кислоту, восстановителем выступала аскорбиновая кислота, а стабилизаторами являлись: лаурилсульфат натрия, лауретсульфат натрия, сульфосукцинат натрия и кокоилизотионат натрия.

Размер частиц образцов исследовали методом динамического рассеяния света на приборе *Photocor Complex*. Электрокинетический потенциал наноселена изучали методом акустической и электроакустической спектроскопии на приборе *DT 1202*.

Анализ полученных данных показал, что оптимальном анионогенным ПАВ для стабилизации наночастиц селена является лауретсульфат натрия ($r = 22,4$ нм, ζ -потенциал = $-14,32$ мВ).

В дальнейшем планируется исследование медико-биологических свойств, полученных образцов *in vivo*.

Литература.

1. Mehta S. K. et al. *Nanotechnology*. 2008, 19(29), 295601.
2. Blinov A. V. et al. *Scientific Reports*, 2022, 12(1), 21975.
3. Ясная М.А. и др. *Соврем. наука и инновации*, 2021, (1), 22-28.

СИНТЕЗ α -Fe₂O₃ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО АКТИВНОСТИ В
ФЕНТОН-ПОДОБНОМ ПРОЦЕССЕ ОКИСЛЕНИЯ КРАСИТЕЛЯ
РОДАМИНА С

А.Г. Магомедова*, А.Б. Исаев

Дагестанский государственный
университет, asiyat_magomedova1996@mail.ru

* Научно-исследовательская лаборатория «Smart Materials»

Процесс Фентона с использованием H₂O₂ и солей железа является одним из наиболее успешно применяемых и широко исследуемых процессов окисления, который проявляет эффективную способность к разрушению широкого спектра загрязняющих веществ [1]. Синтез α -Fe₂O₃(III) проводили электролизом 0,1 М водного раствора NaCl с использованием железных электродов при плотности тока 0,1 А/см². При этом происходило растворение железного анода с образованием Fe(OH)₂. Полученный осадок отфильтровывали и высушивали на воздухе с получением Fe(OH)₃. Затем, полученный Fe(OH)₃, термообрабатывали при температуре 300⁰ С. Каталитическую активность определяли при окислении родамина С в присутствии пероксида водорода. Исследована зависимость скорости окисления родамина С от массовой загрузки α -Fe₂O₃ (от 100 мг/л до 2 г/л). Установлено, что максимальная степень разложения достигается при концентрации 1 г/л, о чем свидетельствует также увеличение константы скорости. Дальнейшее увеличение загрузки катализатора уже не приводит к изменению эффективности процесса. Это связано с тем, что увеличение количества катализатора обеспечивает большее число активных центров разложения H₂O₂ с образованием гидроксильных радикалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ проект №20-33-90220\20.

Литература

1. Gong Q., Liu Y., Dang Z. J. Hazard. Mater. 2019. Vol. 371, P. 677–686.

ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ МЕМРИСТИВНЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА И УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Н.Д. Митюшев 1, Г.Н. Панин 2, А.Н. Баранов 1

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

²Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия
Email: nikita.mit55@gmail.com

Мемристоры - это двухэлектродные устройства, резистивные состояния которых изменяются при прохождении через них заряда, и эти состояния энергонезависимы. 2D материалы, такие как оксид графена (ОГ), позволяют создавать атомарно-тонкие гетерогенные структуры на основе Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий с уникальными электрическими и оптическими свойствами. Двумерные материалы могут быть модифицированы с помощью углеродных наночастиц (УНЧ), что дает возможность эффективно контролировать фоторезистивные состояния с помощью света в широком электромагнитном диапазоне.

Целью нашей работы было создание фоточувствительных мемристивных планарных структур на основе оксида графена с использованием углеродных наночастиц для контроля фоторезистивного переключения в видимом диапазоне.

Последовательность стадий изготовления структур включала:

1. Нанесение золь ОГ на кремниевую (Si/SiO_2) подложку методом накапывания на вращающуюся подложку с последующей сушкой.

2. Восстановление ОГ либо аскорбиновой кислотой, либо гидразином в присутствии фторида аммония. Отделение пленки от подложки путем растворения слоя SiO_2 в плавиковой кислоте, и ее последующий перенос на измерительную структуру, изготовленную методом фотолитографии.

3. Синтез УНЧ, их диализ и нанесение на пленку восстановленного оксида графена (ВОГ).

Полученные наноразмерные, 30-40 нм толщиной пленки были исследованы с помощью КР, ИК и РФЭ спектроскопии, изучена их морфология. На основе этих пленок были изготовлены

фоторезистивные структуры и измерены их вольтамперные характеристики (ВАХ).

НАБЛЮДЕНИЕ СПИНОВОГО ЭКСИТОНА В СОЕДИНЕНИИ (K,NA)FE 2 SE 2 МЕТОДОМ АНДРЕЕВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

В.М. Михайлов, А.И. Болталин #, А.Д. Ильина, С.А. Кузьмичев *,
Т.Е. Кузьмичева *, И.В. Морозов #, И.А. Никитченков #,
А.И. Шилов #

ФГАОУВО “Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)”, Кафедра физики и
технологии наноструктур, mikhailov.vm@phystech.edu
*ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской
академии наук,
#ФГБОУ ВПО ”Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова”

В железосодержащих сверхпроводниках s_{\pm} - волновая симметрия сверхпроводящего параметра порядка реализуется в рамках модели спаривания на спиновых флуктуациях. В таком случае, согласно теории [2] наличие бозонной моды в процессе многократных андреевских отражений будет вызывать появление сателлитов к минимумам субгармонической структуры, от них смещённых по напряжению на величину, соответствующую энергии бозона ε_0/e .

По положениям резких минимумов субгармонических структур на спектрах были определены два сверхпроводящих параметра порядка. Смещённый на напряжение соответствующее энергии $\varepsilon_0 = 6.4$ мэВ вправо относительно главной особенности большего параметра порядка экспериментально наблюдался размытый минимум, связанный, предположительно, с испусканием спинового экситона.

Положения и температурные зависимости бозонных сателлитов совпадают для туннельных контактов, полученных на различных экспериментальных образцах. При этом энергия бозонной моды ε_0 при гелиевой температуре оказывается очень близкой к предположительной сумме меньшего и большего параметров порядка.

Бозонная мода различима вплоть до критической температуры, а её энергия не зависит от геометрии контакта, соответственно, согласно [1], наблюдаемый бозон может являться спиновым экситоном.

Литература.

1. Korshunov M.M. et al. Phys. Rev. B 2016, Vol. 94, p. 094517.
2. Korshunov M.M. et al. Materials 2022, Vol. 15, p. 6120.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ЛИСТОВОГО ПРОКАТА БЕЙНИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИММИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Е.В. Мишурина

НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей»,
mail@crism.ru

В настоящее время с целью снижения затрат на производство листового проката целесообразно исследовать возможность получения стали с различными механическими свойствами, в первую очередь с различными прочностными характеристиками, на базе одного и того же химического состава.

Из предварительных исследований, применяемых в настоящее время при разработке технологий [1-3], наиболее эффективными являются математическое и физическое моделирование структурного состояния металла. Актуальным является вопрос разработки комплексного подхода к предварительным исследованиям, направленным на снижение затрат на промышленные эксперименты при разработке новых технологий производства листового проката. В лабораторных условиях моделирование процессов деформации и термической обработки позволяет сделать пластометр Gleeble-3800 (ЦНИИ КМ «Прометей»). Предметом исследования является технология получения листового проката требуемого качества с различными механическими характеристиками на базе одного химического состава для производства стали марки 09ХН2МД.

Целью работы является моделирование технологии производства высокопрочной судостроительной стали марки 09ХН2МД на испытательном комплексе Gleeble-3800, а также установление закономерностей формирования структур и свойств при варьировании температур закалки и отпуска.

1. Рыбин В. В., Малышевский В. А., Хлусова Е. И. Высокопрочные свариваемые улучшаемые стали. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2016. – 212 с.
2. Голосиенко С. А., Мотовилина Г. Д., Хлусова Е. И. Влияние структуры, сформированной при закалке, на свойства высокопрочной хладостойкой стали после отпуска // Вопросы материаловедения. – 2008. – № 1(53). – С. 32–44.
3. Изменение структуры высокопрочной экономнолегированной стали марки 09ХГН2МД при отпуске / М. В. Голубева, О. В. Сыч, Е. И. Хлусова и др. // Вопросы материаловедения. – 2018. – № 1(93). – С. 15–26.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРОТИВОПОЛОЖНО ЗАРЯЖЕННЫХ КОЛЛОИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ С РАЗЛИЧНОЙ ЖЕСТКОСТЬЮ

С.М. Морозова,¹ Х. Жанг,² Т.Г. Стаценко,^{1,3} К. Ву,⁴ Г. Уолкер,⁴
О. Ганг,² Е. Кумачева⁴

МГТУ им. Н.Э. Баумана, sofiiionova@yandex.ru

¹ МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия.

²Брукхэвенская национальная лаборатория, Аптон, США.

³ИНЭОС РАН, Москва, Россия

⁴Университет Торонто, Торонто, Канада.

Коллоидные кластеры и гели широко распространены в науке и технологиях. Мягкость наночастиц (НЧ) оказывает сильное влияние на межчастичные взаимодействия, однако этот эффект мало изучен. В данной работе мы исследовали влияния мягкости частиц на формирование гелей из смесей противоположно заряженных полимерных (НЧ). Твердые НЧ ($T < T_{ст}$) собирались во фрактальные кластеры, которые впоследствии организовывались в кинетический коллоидный гель, в то время как мягкие НЧ ($T > T_{ст}$) образовывали плотные осаждающиеся агрегаты (рис. 1а). Результаты были подтверждены изучением фрактальной размерности методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) (рис. 1б).

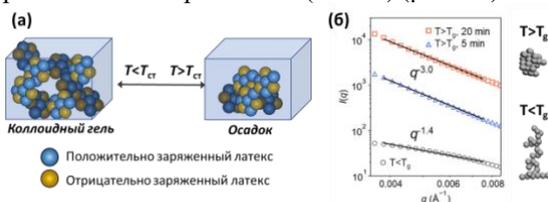


Рис. 1. (а) схема взаимодействия частиц при разной температуре; (б) данные МУРР

Эффект мягкости частиц играет важную роль при разработке коллоидных гелей для применения в качестве чернил в 3D-печати, пищевой промышленности, поглотителях ионов и биотехнологиях.

Благодарность. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №21-79-20113) и с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ. Исследования МУРР были выполнены в рамках заявки № 309801 в Центре функциональных наноматериалов Брукхэвенской национальной лаборатории.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ДИСПЕРСОИДОВ С КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ

А. Мухамеджанова, А.В. Михайловская, А.Г. Мочуговский

Национальный исследовательский технологический университет
«МИСИС», 98_aim@mail.ru

Целью исследования является анализ закономерностей влияния химического состава сплавов и режимов обработки на параметры микроструктуры деформированных полуфабрикатов, кинетику рекристаллизации и механические свойства. Получены слитки исследуемых сплавов с помощью наполнительного литья в медную водоохлаждаемую изложницу. Проведен анализ их исходной структуры и фазового состава методами рентгенофазового анализа, электронной сканирующей и просвечивающей микроскопии, исследована кинетика распада пересыщенного переходными элементами алюминиевого твердого раствора в процессе отжига слитков путем анализа изменения твердости и электросопротивления, методом просвечивающей электронной микроскопии определены параметры частиц дисперсоидов, образующихся в процессе отжига литых и деформированных образцов в интервале температур 300–450°C, что позволило определить температурно-временные условия термообработки и основные легирующие элементы и их концентрации, обеспечивающие формирование наноразмерных дисперсоидов квазикристаллической икосаэдрической фазы. Изучены механические свойства образцов исследуемых сплавов, полученных по разным режимам термомеханической обработки, в том числе содержащих дисперсоиды квазикристаллической фазы.

Низкотемпературный отжиг исследуемых сплавов обеспечил формирование равноосных дисперсоидов I-фазы с квазикристаллическим типом структуры и средним размером 18–35 нм, которые практически не меняли морфологию и размер в процессе термомеханической обработки. Предварительная деформация на 30–80% ускорила кинетику распада и обеспечила повышенную плотность распределения дисперсоидов и, как следствие, прирост твердости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ для ведущих научных школ НШ-1752.2022.4.

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАРУШЕННЫХ СЛОЁВ В КЕРАМИЧЕСКИХ МАТРИЦАХ НА ОСНОВЕ ИТТРИЙ АЛЮМИНИЕВОГО ГРАНАТА ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ИОНАМИ

А.А. Назаров 1, 2, А.В. Нохрин 1, П.А. Юнин 2, П.В. Андреев 1,
Л.С. Алексеева 1

- 1) ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия;
- 2) Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород, Россия.
nazarov.artem6230@gmail.com

Керамика со структурой иттрий-алюминиевого граната (YAG) является перспективным материалом для консолидации радиоактивных отходов. Исследование радиационной стойкости материалов происходит путем облучения высокоэнергетическими тяжелыми ионами. В работе исследована серия керамических образцов состава $Y_{2.5}Nd_{0.5}Al_5O_{12}$, изготовленных методом электроимпульсного плазменного спекания и подвергнутых облучению высокоэнергетическими тяжелыми ионами Xe (146 МэВ) с флюенсом в интервале 10^{12} – 10^{13} см⁻² на циклотроне ИЦ-100 Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ, г. Дубна. Исследование поверхности образцов, подвергнутой радиационному воздействию, проведено методом рентгеновской дифрактометрии на приборе Bruker D8 Discover.

Качественный фазовый анализ показал, что исходные образцы содержат кристаллические фазы YAG. На дифрактограммах облучённых образцов помимо $YAlO_3$ наблюдаются дифракционные максимумы двух изоструктурных YAG кристаллических фаз, одна из которых имеет параметр элементарной ячейки близкий к фазе исходного YAG. Вторая фаза, названная нами деформированный YAG, имеет на 1-5% больший параметр элементарной ячейки. Эксперименты в геометрии скользящего падения (от 1° до 30°) первичного пучка позволили установить преимущественную локализацию деформированной фазы в приповерхностном слое толщиной несколько микрон. Также показано увеличение деформации и степени аморфизации в приповерхностном слое с ростом флюенса ионов.

Рентгенодифракционные исследования образцов выполнялись в ИФМ РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (г/з № 0030-2021-0030). Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-21-00145_Росатом.

ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПНИКТИДОВ $\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$ С ВАРИАЦИЕЙ СТЕПЕНИ ДОПИРОВАНИЯ В НОРМАЛЬНОМ СОСТОЯНИИ

И.А. Никитченков 1, В.А. Власенко 2, А.Д. Ильина 1,3,
С.А. Кузьмичев2,1, Т.Е. Кузьмичева 1, В.М. Михайлов 1,3,
К.С. Перваков2

1 МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

2 Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

3 Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

E-mail: nikitchenkov.ia19@physics.msu.ru

$\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$ имеет слоистую структуру, в которой сверхпроводящие (СП) блоки FeAs чередуются в с-направлении с плоскостями Ba . При электронном допировании антиферромагнетизм $\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$ постепенно подавляется и возникает СП фаза, образующая «колокол», с максимальной критической температурой $T_c \approx 21$ К [2]. В исследуемых монокристаллах $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ ($x = 0.06, 0.08, 0.12$ и 0.14) при $T = 4.2$ К с помощью техники «break-junction» [4] создавались контакты СП-барьер-СП (ScS). Согласно подходу [1], в нормальном состоянии $dI(V)/dV$ -спектр такого контакта определяется распределением плотности электронных состояний $N(E)$ вблизи уровня Ферми E_F .

Ниже T_c в ScS-контактах наблюдался эффект многократных андреевских отражений. Помимо этого, ВАХ и $dI(V)/dV$ демонстрировали отдельную от андреевской сильную нелинейность (структура минимум-максимум) как в СП, так и в нормальном состоянии, схожую по форме с «псевдощелью», наблюдаемой в ВТСП купратах. Форма нелинейности воспроизводится, сохраняется с увеличением температуры до 40-50 К, схожа для образцов с разной степенью допирования и T_c . Данный эффект может быть обусловлен особенностями распределения плотности электронных состояний $N(E)$ вблизи E_F [1], связанными с зонной структурой $\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$. С другой стороны, можно предположить перенормировку $N(E)$ в нормальном состоянии вследствие резонансного электрон-бозонного взаимодействия [3].

Литература

1. Giaever I., Megerle K. // Phys. Rev. 1961. Vol. 112. P. 1101
2. Xingye Lu. // Springer Theses 2017.
3. Бобров Н. Л. // УФН 2020. Т. 190. С. 1143.
4. Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е. //ФНТ, 2016, т. 42, № 11, с. 1284.

ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ В ДРОБОВОМ ШУМЕ ДВУМЕРНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА

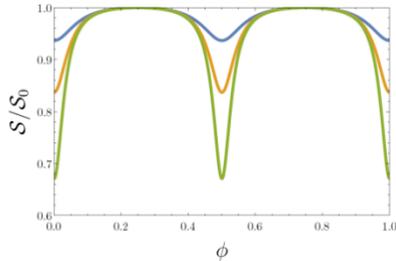
Р.А. Ниязов, Д.Н. Аристов, В.Ю. Качоровский*

НИЦ Курчатовский Институт – ПИЯФ, niyazov_ra@npri.nrcki.ru

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

Теоретически исследовано поведение дробового шума [1] в двумерных топологических изоляторах в режиме квантового спинового эффекта Холла. При наличии подводящих металлических контактов они естественным образом представляют собой квантовые интерферометры, потому что на краю содержат проводящие электронные состояния. Это геликоидальные состояния – электроны с разным спином распространяются в противоположные стороны. В таких системах интерференционные вклады в контактанс появляются, только при наличии магнитной примеси на краю [2].

В работе изучался дробовой шум. Эта величина связана с флуктуацией тока из-за дискретности электрона. Была исследована ее зависимость от магнитного потока (см. рис.). Показано, что даже без магнитной примеси (зеленая кривая) существуют антирезонансы при полужелтых значениях магнитного потока.



Таким образом, интерференционные эффекты вносят большой вклад в дробовой шум, чем в контактанс. На основе этого явления возможно создание высокочувствительных детекторов магнитного поля.

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

Литература.

1. Y.V. Nazarov, Y.M. Blanter, Quantum Transport. Cambridge University Press. 2009.
2. R.A. Niyazov, D.N. Aristov, V.Y. Kachorovskii, JETP Letters 113, p. 689-700 (2021).

БИ-ПЬЕЗОФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПОРИСТЫХ МЕМБРАН ПВДФ/ViFeO₃ ПОСРЕДСТВОМ СВЕТОВОЙ И УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ

Ф.Ф. Оруджев*

ФГБОУ ВО «Дагестанский Государственный Университет»,
farid-stkha@mail.ru

* Научно-исследовательская лаборатория «Smart Materials»

Создание стимул-чувствительных умных материалов для каталитических приложений, способных с высокой эффективностью разлагать органические загрязнители, является актуальной задачей [1]. Методом отливки и термической инверсии фаз (TIPS) были синтезированы двухфазные полимер-неорганические композитные мембраны, из полимера поливинилиденфторида (ПВДФ) с иммобилизованными наночастицами ViFeO₃ (VFO). Были исследованы оптические, структурные, магнитные и каталитические свойства.

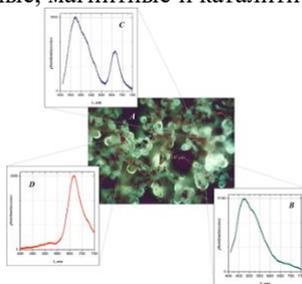


Рисунок 1. Флуоресцентный микроснимок (А) при увеличении 500×, а также спектры фотолуминесценции различных участков полимерного образца (В-Д).

Показано, что мембраны имеют высокую долю электроактивной фазы ПВДФ и высокую кристалличность (более 90%). Это обусловило высокую фотокаталитическую активность мембраны по отношению к деструкции Метиленового синего при облучении УФ-видимым светом (95 % за 20 мин). При одновременном облучении светом и обработкой УЗ уже к 15 минуте достигается 96%.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (Проект № 22-73-10091)

Литература.

1. Orudzhev F. et al., *Polymers.*, 2023, Т. 15- №. 1. – С. 246.

СТРУКТУРА И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ β -Zn₄Sb₃

В.П. Панченко, М.В. Воронов, Н.Ю. Табачкова*, М.К. Таперо*

НИЦ «Курчатовский Институт», vpranchenko@mail.ru

* Национальный исследовательский технологический университет
«МИСиС»

Антимонид цинка Zn₄Sb₃ является одним из перспективных термоэлектрических материалов из класса разупорядоченных полупроводников [1-2]. Однако важным является вопрос получения эффективного и термостабильного Zn₄Sb₃ [3].

Было проведено сравнение двух технологических схем получения материала Zn_{4+x}Sb₃. В первой схеме синтез материала осуществляли механохимическим методом (МХС), во второй – прямым сплавлением компонентов. Компактирование образцов в обоих случаях проводили методом искрового плазменного спекания. В результате исследования фазового состава, термоэлектрических свойств и термостабильности полученных образцов в диапазоне рабочих температур (300-725 К), было установлено преимущество сплавного метода синтеза изучаемого материала перед МХС. Установлено, что для воспроизводимого получения однофазного материала Zn₄Sb₃ необходимо проводить синтез с избыточным содержанием цинка в исходной шихте.

Исследовано влияние легирования индием на структуру и термоэлектрические свойства Zn₄Sb₃. Показано, что легирование In необходимо для получения термостабильной структуры Zn₄Sb₃.

В результате были установлены режимы синтеза, концентрация избыточного цинка, концентрация индия, режимы компактирования необходимые для воспроизводимого получения термостабильного материала с высокой термоэлектрической добротностью $zT \sim 1,55$ при 673 К.

Данная работа проведена в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

Литература.

1. J. Lin, et al., Mater. Lett., 2017, p. 5-8.
2. A. P. Gonçalves and C. Godart, Eur. Phys. J. B, 2014, p. 1-29.
3. T. Dasgupta, et al., J. Electron. Mater., 2013, p. 1988-1991.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТА КОБАЛЬТА

М.А. Пирогов, А.А. Гвозденко, А.Б. Голик, Д.А. Жуковский,
А.М. Фесенко

ФГАОУ-ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»,
pirogov.m.2002@gmail.com

В настоящее время разработка сенсоров с повышенной точностью на основе гексацианоферратов (ГЦФ) *d*-элементов для определения глюкозы, H_2O_2 и других соединений, является актуальной задачей. Это обусловлено их уникальными оптическими, химическими и каталитическими свойствами [1-2].

Таким образом, целью данной работы стало исследование процесса получения наночастиц гексацианоферрата кобальта, как инновационного материала для сенсорных устройств.

Синтез наночастиц ГЦФ *Co* проводился путём смешивания 0,001*M* раствора $K_3[Fe(CN)_6]$ и 0,0015*M* раствора $Co(NO_3)_2$ в соотношениях 16:1, 8:1, 4:1, 2:1, 1:1, 1:2, 1:4, 1:8, 1:16.

Исследование оптических свойств полученных образцов проводилось на спектрофотометре СФ-56. Исследование гидродинамического радиуса частиц проводилось на многоугловом анализаторе размеров частиц *Photocor Complex*.

В результате анализа данных установлено, что наименьшим гидродинамическим радиусом ($R = 32,2 \pm 1,6$ нм) обладает образец, полученный при соотношении – 4:1. В спектре данного образца наблюдается максимум $\lambda = 500$ нм, соответствующий $n \rightarrow \pi^*$ переходу, характерному для ГЦФ *Co*.

В дальнейшем планируется провести исследование процесса формирования плёнок ГЦФ *Co* на поверхности проводящих материалов.

Исследования проводятся при финансовой поддержке Федерального государственного бюджетного учреждения «Фонд содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (Фонд содействия инновациям)», Договор № 17164ГУ/2021 от 16.12.2021.

Литература.

1. M.S. Lin, W.C. Shih. *Analytica chimica acta*, 1999, 381(2-3), 183-189.
2. X. Cui, G. Liu, Y. Lin. *Journ. Biomed. Nanotech*, 2005, 1(3), 320-327.

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ЛЮМИНОФОРЫ: СИНТЕЗ МОЛЕКУЛ С УГЛЕРОДНЫМ РАЗВЕТВЛЯЮЩИМ ЦЕНТРОМ И ОТЛИЧИЕ ИХ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОТ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ

Р.А. Поляков, О.В. Борщёв, С.А. Пономаренко, Е.А. Свидченко,
М.С. Скоротецкий, Н.М. Сурин

Институт синтетических полимерных материалов
им. Н.С. Ениколопова, r.polyakov@ispm.ru

Данная работа нацелена на сравнение оптических свойств наноструктурированных люминофоров(НЛ) с углеродным и кремниевым центрами ветвления (схема 1) [1], обладающих внутримолекулярным переносом энергии [2]. Выбранные молекулы включают четыре одинаковых донорных фрагмента (*para*-терфенил (**3P**), 2,5-дифенилоксазол (**PPO**)) и один акцепторный 1,4-бис(5-фенилоксазол-2-ил)бензол (**POPOP**).

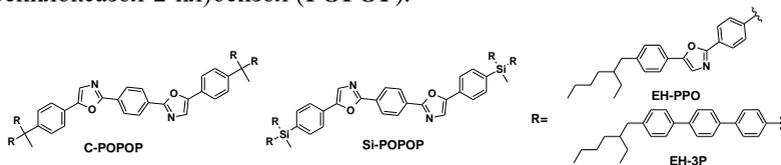


Схема 1. Структура рассматриваемых люминофоров.

В результате определена схема синтеза углеродных аналогов кремнийорганических НЛ. Показан синтез нового прекурсора – нового углеродного трифункционального центра ветвления, который позволяет получить целевые продукты с проведением реакций кросс-сочетания. Структура полученных люминофоров подтверждена с помощью ¹H ЯМР-спектроскопии, чистота продуктов доказана с помощью гелипроникающей хроматографии, описаны оптические свойства разбавленных растворов двух люминофоров в ТГФ и проведено сравнение их свойств.

Эта работа выполнена благодаря поддержке Президентского гранта для ведущих научных школ НШ-3843.2022.1.3.

Литература.

1. Borshchev O. V., Surin N. M., Skorotetsky M. S., Ponomarenko S. A., INEOS OPEN., 2019, 2, 4, p. 112–123
2. Ponomarenko S. A., Surin N. M., Skorotetsky M. S., Borshchev O. V., Pisarev S. A., Svidchenko E. A., Fedorov Y. V., Molins F., Brixner T., J. Mater. Chem. C., 2019, 7, 46, p. 14612-14624.

РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОЭМИССИЯ В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ RNi_2Mn ($R = Tb, Er, Dy$)

Е.А. Пономарева#, В.И. Гребенников#, *, Е.Г. Герасимов#, **,
Н.В. Мушников#, ** и Т.В. Кузнецова#, **

ИФМ УрО РАН, ponomareva@imp.uran.ru

* ФГБОУ ВО «Уральский государственный университет путей
сообщения»

** ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина»

Исследование редкоземельных интерметаллидов представляет интерес из-за их уникальных магнитных свойств, таких как магнитокалорический эффект, а также особенностей электронной структуры [1-2]. Соединения RNi_2Mn ($R = Tb, Er, Dy$) кристаллизуются в кубическую структуру типа $MgCu_2$ (пространственная группа $Fd3m$) при сплавлении чистых исходных компонентов в атмосфере аргона [3]. Добавление марганца в соединения типа RNi_2 приводит к изменению магнитных свойств, в частности к увеличению температуры Кюри [2], при этом электронная структура изменяется в зависимости от переходного и редкоземельного элемента.

Целью настоящей работы является исследование особенностей электронной структуры интерметаллидов RNi_2Mn ($R = Tb, Er, Dy$) методом резонансной фотоэмиссионной спектроскопии. Эксперименты выполнены в Российско-Германской лаборатории (RGL) на синхротронном источнике BESSY II в Центре им. Гельмгольца (Берлин, Германия). Основными задачами были определение вкладов 4f -состояний редкоземельных элементов и 3d-состояний переходных металлов в валентную полосу, анализ степени локализации этих состояний. Проанализирована 3d – 4f и 4d – 4f резонансная фотоэмиссия на редкоземельных атомах Tb, Er, Dy. Наблюдаемые резонансные эффекты в целом аналогичны, однако они значительно различаются по величине. Показано принципиальное отличие резонансных процессов на редкоземельных и переходных элементах.

Литература.

1. F.W. Wang, et. al., Appl. Phys. Lett. **77**, 1360 (2000).
2. J.L. Wang, et. al., Phys. Rev. B **73**, 094436 (2006).
3. N.V. Mushnikov, et. al., Phys. Rev. B **79**, 184419 (2009).

НОВЫЕ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЕ ЛЮМИНОФОРЫ С ВЫСОКИМ ТОРСИОННЫМ УГЛОМ

В.В. Попова, О.В. Борщев, С.А. Пономаренко, Е.А. Свидченко,
М.С. Скоротецкий, Н.М. Сурин

ФГБУН Институт синтетических полимерных материалов им.
Н.С. Ениколопова Российской академии наук, vv.popova@ismpr.ru

Донорно-акцепторные системы высоко востребованы в разных областях органической электроники благодаря своим уникальным свойствам. В данной работе в качестве акцепторного блока используется 2,1,3-бензотиадиазол. Его исключительные фотоэлектронные свойства позволяют синтезировать эффективные люминофоры с различными донорными блоками [1, 2].

Применение 1,4-диметилбензола в качестве донорных фрагментов с молекулой бензотиадиазола может привести к увеличению торсионного угла между этими звеньями. Изменение копланарности молекулы приводит к нарушению сопряжения и изменению оптических свойств.

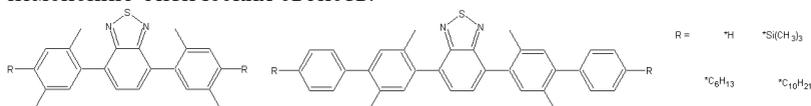


Рис. 1 Химическая структура полученных люминофоров

Основная цель работы – исследование взаимосвязи химической структуры и свойств таких систем. Для этого был синтезирован ряд новых симметричных люминесцентных молекул, состоящих из электроакцепторного центра бензотиадиазола, 1,4-диметилбензола и бензольных фрагментов, а также молекулы с различными терминальными заместителями – алкильными и триметилсилильными (рис. 1) для изучения кристаллической упаковки.

Исследование выполнено за счёт гранта РФФ № 22-13-00255.

Литература.

1. Skorotetsky M.S., Krivtsova E.D., Borshchev O.V., Surin N.M., Svidchenko E.A., Fedorov Y.V., Pisarev S.A., Ponomarev S.A. *Dyes and Pigments*. 2018, 155, 284-291.
2. Postnikov V.A., Lyasnikova M.S., Kulishov A.A., Sorokina N.I., Voloshin A.E., Skorotetsky M.S., Borshchev O.V., Ponomarev S.A. *Physics of the solid state*. 2019, 61(12), 2322-2355.

ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ И ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СТАЛЕЙ КОРПУСОВ РЕАКТОРОВ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ НИКЕЛЯ

А.А. Потехин¹, Е.А. Кулешова^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт», e-mail: alexbiver@mail.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Никель – один из важнейших легирующих элементов, используемых при производстве материалов корпусов реакторов (КР). Он необходим для обеспечения достаточного уровня прокаливаемости, прочностных и вязкопластических характеристик изделия. Эволюция химического состава сталей КР шла в основном по пути изменения содержания никеля и примесных элементов в сталях.

В сталях КР ВВЭР-440 содержание никеля не превышало 0,4 масс.%. Затем в материалах КР ВВЭР-1000 для повышения механических характеристик и степени прокаливаемости содержание никеля было увеличено до 1-2 масс.%. Для КР ВВЭР-1200 содержание никеля было ограничено 1,3 масс.%, также были введены жёсткие ограничения по содержанию примесных элементов.

Для перспективных реакторов, работающих при сверхкритических параметрах теплоносителя, потребовалось разработать новую корпусную сталь с увеличенной категорией прочности, способную выдерживать воздействие высоких температур, радиационных и механических нагрузок. Содержание никеля в стали было увеличено до 4-5 масс.%. Однако повышенное содержание никеля приводит к увеличению темпа радиационного охрупчивания из-за увеличения плотности радиационно-индуцированных преципитатов и образования зернограничной сегрегации (косегрегации с примесными элементами). Для ограничения отрицательного влияния никеля был пересмотрен химический состав стали. В частности, для уменьшения плотности радиационно-индуцированных преципитатов содержание марганца было снижено до сверхнизких значений. Также была произведена глубокая очистка материала по примесям, прежде всего по фосфору из-за его накопления в зернограничных сегрегациях. Кроме того, была создана более мелкая зёрненная структура, что привело к уменьшению удельной концентрации фосфора на границах зёрен.

В данной работе приведены результаты структурных исследований сталей КР с различным содержанием никеля для выявления его влияния на структурные особенности и служебные характеристики.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ РЯДА AnO_2 ($An = Th - Cf$)

А.Е. Путков*, **, Ю.А. Тетерин*, **, М.В. Рыжков***, К.И. Маслаков*, **, А.Ю. Тетерин*, К.Е. Иванов*, С.Н. Калмыков**, В.Г. Петров**

* НИЦ Курчатовский Институт, andrei.putkov@mail.ru

** Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

*** Институт химии твердого тела УрО РАН

На основе результатов расчетов электронного строения AnO_2 ($An = Th - Cf$) релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ) установлено, что в этих диоксидах возникают внешние валентные (ВМО, 0 – ~15 эВ) и внутренние валентные молекулярные орбитали (ВВМО, ~15 – ~50 эВ). Показано, что в AnO_2 An 5f, 6s, 6p АО не являются атомными, а непосредственно участвуют в химической связи. При этом состав ВМО с участием An 6d, 7s и 7p АО мало изменяется в ряду AnO_2 ($An = Th - Cf$). Эти орбитали вместе с O 2s и O 2p АО образуют «жесткий каркас», в котором перемещаются МО, содержащие вклады An 5f АО.

В спектрах РФЭС в ряду AnO_2 ($An = Th - Cf$) возрастает относительная интенсивность полосы электронов ВМО. Это связано с увеличением плотности состояний 5f-электронов в зоне ВМО, значения сечения фотоэффекта для которых существенно превышают соответствующие значения для An 7s-, 7p- и O 2p-электронов. Структура спектра РФЭС, обусловленная электронами ВВМО, возникающая из-за сильного перекрывания An 6p и O 2s АО ближайших атомов, как правило, хорошо разрешена и отражает строение ближайшего окружения ионов актиноидов, расстояния от них до ближайших ионов и характер химической связи.

В единой шкале энергий получены зависимости экспериментальных и рассчитанных энергий связи электронов МО от Z в ряду AnO_2 ($An = Th - Cf$) и найдено удовлетворительное согласие между ними. Показано, что для всех ионов An в ряду AnO_2 эффективный заряд существенно меньше +4, принимаемого в ионном приближении. На основе результатов расчетов заселенностей связей по Малликену найдено, что в этих диоксидах в совокупности электроны ВВМО на ~30% ослабляют химическую связь, обусловленную электронами ВМО.

СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОЛИМЕР-НЕОРГАНИЧЕСКИХ МЕМБРАН ДЛЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

А.А. Рабаданова, Д.А. Селимов, А.О. Шуайбов, Ф.Ф. Оруджев*

ФГБОУ ВО «Дагестанский Государственный Университет»,
rabadanova.alinka@mail.ru

* Научно-исследовательская лаборатория «Smart Materials»

Создание стимул-чувствительных умных материалов для каталитических приложений, способных с высокой эффективностью разлагать органические загрязнители, на данный момент является важнейшей задачей [1]. Особые преимущества представляют гибридные функциональные материалы, которые сочетают и комбинируют в себе свойства 2–3 х материалов. Методом инверсии фаз из не растворителя (NIPS) были синтезированы новые двухфазные полимер-неорганические композитные пленки, состоящие из сегнетоэлектрического полимера поливинилиденфторида (ПВДФ) и нанокристаллического полупроводникового мультиферроика BiFeO_3 (BFO).

Образцы исследовали методами сканирующего электронного микроскопа (СЭМ), инфракрасной Фурье-спектроскопии (FTIR), дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), термогравиметрического анализа (ТГА), вибрационного магнитометра (VSM), фотолюминесцентной микроскопии и рентгеноструктурного анализа (XRD).

Результаты фотокаталитических экспериментов показали, что при облучении УФ светом композитных пленок с различным процентным содержанием BFO (2%,5%,10%,15%,20%) составили 92 %, 96.9 %, 89.5 %, 90.5 %, 96 %.

Литература.

1.Orudzhev F. et al., *Polymers.*, 2023, Т. 15- №. 1. – С. 246.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА Ni-ЗАМЕЩЕННОГО ФЕРРИТА ВИСМУТА

Г.С. Римский*, И.И. Макоед

БрГУ имени А.С. Пушкина, Брест, Беларусь

*НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь,
grigorij.rimskij@mail.ru

Сложные оксиды со структурой перовскита широко используют для создания новых функциональных материалов, востребованных в устройствах современной электроники. Это обусловлено обнаружением высоких значений величин удельных намагниченностей в допированном никелем ViFeO_3 . Целью работы – исследование изменения структуры и магнитных свойств катионзамещенного феррита висмута $\text{ViFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 0.25$), синтезированного в различных условиях. Выбор Ni^{2+} обусловлен различием величин магнитных моментов и близостью ионного радиуса относительно Fe^{2+} . Хотя магнитный момент у никеля меньше, чем у железа, оба элемента принадлежат одной группе, что является фактором, способствующим установлению и осуществлению магнитных взаимодействий.

По керамической технологии в различных условиях синтезированы образцы $\text{ViFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$. Результаты рентгеноструктурного анализа подтверждают кристаллизацию основной фазы в ромбоэдрической решетке, изоструктурной номинально чистому ViFeO_3 . При синтезе методом твердофазных реакций неизбежно образуются вторичные фазы муллитового $\text{Vi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ и силленитового $\text{Vi}_{25}\text{FeO}_{39}$ типа. Для снижения содержания доли $\text{Vi}_{25}\text{FeO}_{39}$ использовано выщелачивание шихты, предварительно обожженной при температуре, меньшей 675°C , выше которой образуется $\text{Vi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$. С ростом концентрации замещающих катионов появляется шпинельная фаза NiFe_2O_4 , образование которой способствует связыванию избыточных катионов Fe^{3+} и препятствует появлению фазы муллита.

Результаты измерений температурных зависимостей удельной намагниченности подтверждают факт наличия слабого ферро- / ферримагнитного упорядочения. Высокотемпературное ($T = 805\text{--}808\text{ K}$) магнитное превращение протекает при температуре, близкой к точке Кюри ферримагнетика NiFe_2O_4 $T_C \approx 853\text{ K}$. При более высоких температурах тепловое движение приводит к разрушению

ферримагнитного упорядочения 3d-катионов. Частичная замена катионов железа катионами никеля приводит к уменьшению пространственной спин-модулированной структуры и возникновению в $\text{BiFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ магнитного отклика, обусловленного коллективным действием различных типов магнитных взаимодействий.

ТЕРМОДИНАМИКА ОБОЛОЧЕК ТВЭЛОВ ИЗ ФЕРРИТНО-
МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С
НИТРИДНЫМ ТОПЛИВОМ В ПРИСУТСТВИИ РЕАКТОРНОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ И СРАВНЕНИЕ С АНАЛОГИЧНЫМИ ПРОЦЕССАМИ
ДЛЯ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ

В.А. Русинкевич, А.С. Иванов

НИЦ "Курчатовский институт", rusinkv@mail.ru

Основными целями настоящей работы являются: изучение и сравнительный анализ взаимодействия аустенитной (ЧС68-ИД) и ферритно-мартенситной (ЭП823-Ш) сталей с нитридным топливом.

Особый интерес представляет влияние примесей углерода и кислорода на фазовый и химический состав топлива при его облучении.

Дело в том, что рассматриваемое нитридное топливо является источником углерода. Причинами обеднения границ зёрен хромом являются высокая скорость диффузии углерода и низкая скорость диффузии хрома, вследствие чего в образовании карбидов участвует почти весь углерод сплава, а хром — только пограничной зоны, где и идёт образование карбидов. В результате этого процесса прилегающие к границам зёрен участки сплава обедняются хромом. Его содержание может упасть ниже 12%, которые необходимы для поддержания пассивности.

В ферритно-мартенситных сталях ситуация может быть существенно другой.

В настоящей работе проведены расчеты термодинамики моделируемых систем «нитридное топливо + оболочки из сталей ЧС68-ИД и ЭП823-Ш».

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУР БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЛИСТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ СВАРКОЙ ВЗРЫВОМ И ПАКЕТНОЙ ПРОКАТКОЙ

П.А. Салей, Г.Д. Мотовилина, Г.Ю. Калинин

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей»,
Санкт-Петербург, e-mail: mail@crism.ru

В данной работе представлены результаты сравнительного исследования зоны контакта основного и плакирующего слоев сталей, изготовленных двумя методами: сваркой взрывом – E500W+316L, пакетной прокаткой - F500WArc+304L. Рассмотрено влияние технологии нанесения плакирующего слоя на особенности структуры и размер зоны сцепления слоев.

Биметалл – уникальный материал, являющийся альтернативой гомогенной стали. Благодаря сочетанию в себе служебных характеристик и высокой коррозионной стойкости, применение двухслойного металла увеличивает результативность производства и долговечность целого ряда корпусных конструкций.

По результатам металлографического анализа в сталях F500WArc+304L и E500W+316L охарактеризованы линии сцепления между слоями, определены структуры плакирующего и основного слоев.

Также установлено, что ширина области изменения микротвердости в зоне контакта плакирующего и основного слоев определяется структурными изменениями, связанными с технологией нанесения плакирующего слоя. В листе, изготовленным способом пакетной прокатки, область изменения микротвердости составляет ~ 0,55 мм, а в листе, изготовленным сваркой взрывом ~ 0,4 мм в листе.

Зоны изменения легирования также различаются в зависимости от способа изготовления листов. Лист плакированной стали, изготовленный пакетной прокаткой, имеет зону изменения легирования шире примерно в три раза (~ 6 мкм), чем в листе плакированной стали, изготовленным методом сварки взрывом.

Анализ механических свойств образцов на растяжение и сопротивление срезу показал, что оба биметалла показали уровень механических свойств выше требуемых значений, но более высокий уровень свойств характерен для листа, изготовленного методом сварки взрывом, не смотря на дефекты, выявленные у ЛС.

ЛАЗЕРНАЯ ОБРАБОТКА КЕРАМИКИ AlN ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

А.А Свиридова, А.С. Щекин, В.Н. Петровский

Национальный исследовательский ядерный университет
"МИФИ", lina.sviridova.1412@mail.ru

В данной работе представлено изготовление проводящего алюминиевого слоя на поверхности керамической подложки AlN за счет влияния импульсного лазерного излучения, проведено исследование влияния параметров лазерной обработки волоконного иттербиевого лазера с длиной волны 1,064 мкм на степень металлизации и качество поверхности алюмонитридной керамики. Были выполнены опыты по созданию структур с наименьшим сопротивлением и получены зависимости сопротивления, толщины проводящего слоя и шероховатости поверхности от перекрытия импульсов, мощности в воздухе и аргоне. Благодаря эффективному процессу металлизации полученные результаты могут быть использованы для нанесения меди на печатные платы за счёт гальванического меднения, что позволяет результативно решить актуальную проблему ускорения, упрощения и сокращения ресурсов процесса создания продуктов микроэлектроники.

СИНТЕЗ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОРОШКОВСИСТЕМЫ Al-Si₃N₄, ДОПОЛНИТЕЛЬНО АРМИРОВАННЫХ УПРОЧНЯЮЩЕЙ ФАЗОЙ ТИПА SiAlON

Н.А. Сердюк, Т.И. Бобкова

НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ
«Прометей», mail@crism.ru

В работе представлены результаты по механохимическому синтезу композиционных порошков с конгломерированным объемно-упрочненным типом гранул (Рис. 1. а) для напыления износостойких покрытий (Рис. 1. б), обеспечивающих высокую твердость ответственных деталей и узлов из алюминия. В качестве исходной системы материалов для синтеза композиционных порошков методом совместной интенсивной деформации выбраны порошок алюминия марки ПАВЧ и нанопорошок нитрида кремния Si₃N₄. Синтез реализован на установке ИВЧ-3 с вариацией режимов в диапазоне 3-15 минут.

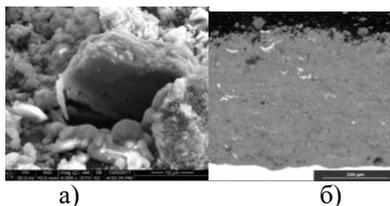


Рисунок 1. Морфология материалов на основе системы Al-Si₃N₄ а) синтезированный порошок, б) поперечный шлиф композиционного покрытия

Дифрактограммы композиционных порошков на углах отражения, на которых у гомогенизированных порошков аналогичного состава (до механосинтеза) отчетливо видны пики фазы алюминия, обнаружены пики фаз алюминия со значительно меньшей интенсивностью, а также дополнительные фазы нитрида кремния, отличающиеся от исходных, что говорит о синтезе дополнительной армирующей фазы типа SiAlON, образовавшейся, вероятнее всего, за счет взаимной диффузии тонкой оксидной пленки алюминия и нитрида кремния. Согласно результатам термогравиметрических исследований композиционных порошков системы Al-Si₃N₄ определено, что для достижения микротвердости напыляемого покрытия порядка 7,1 ГПа, необходимо проводить механосинтез в течение 9 минут, так как при таком режиме формируется трехмерный каркас из фазы типа SiAlON в конгломератных гранулах

предположительно на границе раздела фаз алюминия и нитрида кремния.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМАХ $MCl-CuCl_2-H_2O$ ($M = Cs^+, Rb^+, CH_3^+$)

Е.В. Сидорова, Е.С. Смирнова, В.А. Коморников, О.А. Алексеева

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, soul7418@gmail.com

Кристаллы двойных солей на основе меди демонстрируют разнообразные типы атомного упорядочения, что приводит к многообразию проявляющихся в них физических свойств. Образующиеся в системах $MCl-CuCl_2-H_2O$ ($M = Cs^+, Rb^+, CH_3^+$) кристаллы интересны как оптические и магнитные материалы, в том числе квантовые антиферромагнетики.

В данной работе исследовались состав и строение серии кристаллов, полученных из раствора в системах $MCl-CuCl_2-H_2O$ ($M = Cs^+, Rb^+, CH_3^+$) при комнатной температуре. Кристаллы выращены методом спонтанной кристаллизации из растворов с разным соотношением исходных компонентов согласно диаграммам растворимости [1]. Рентгенофазовый анализ полученных кристаллов выполнен с использованием рентгеновского порошкового дифрактометра Rigaku Miniflex600. Рентгеноструктурный анализ отобранных из каждой серии монокристаллических образцов проводился с использованием дифрактометра XtaLAB Synergy-DW (Rigaku Oxford Diffraction).

В ходе анализа установлено, что среди кристаллов, выращенных в системах $MCl-CuCl_2-H_2O$ ($M = Cs^+, Rb^+, CH_3^+$), существуют монокристаллические фазы: Cs_2CuCl_4 , $Cs_3Cu_2Cl_7 \cdot 2H_2O$, $CsCuCl_3$ и $Rb_2CuCl_4 \cdot 2H_2O$. Определена структура отобранных монокристаллов, проанализировано координационное окружение атомов Cu и $M = Cs^+, Rb^+$ и длины химических связей.

Полученная информация будет использована для дальнейшего исследования процессов фазообразования в четырехкомпонентных водно-солевых системах с хлоридом меди $MCl-CuCl_2-H_2O$.

Литература:

1. Соболева Л.В. Выращивание новых функциональных монокристаллов. М., 2009.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ И РАЗМЕРОВ ЗЁРЕН В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ ОБРАЗЦОВ КЕРАМИКИ КАРБИДА ВОЛЬФРАМА

К.Е. Сметанина, П.В. Андреев, Е.А. Ланцев, А.А. Мурашов

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского, smetanina@nifti.unn.ru

Электроимпульсное плазменное спекание (ЭИПС) порошков является одним из наиболее эффективных способов получения материалов на основе карбида вольфрама (WC) с высокой плотностью и повышенными механическими свойствами. В процессе ЭИПС порошок удерживается в графитовой пресс-форме с помощью графитовых пуансонов, в качестве уплотнителя используется графитовая фольга. Особый интерес представляет обнаруженный ранее эффект диффузии углерода с графитовых деталей в поверхностные слои образцов керамики. С одной стороны, диффузия углерода способствует восстановлению до α -WC нежелательных фаз (W_2C в образцах керамики WC и η -фаз (например, Co_3W_3C) в твёрдых сплавах WC–Co). С другой – может приводить к аномальному росту зёрен в слое, в который продиффундировал углерод.

Целью данной работы являлось исследование распределения кристаллических фаз и размеров зёрен в поверхностных слоях образцов керамики на основе WC. В качестве исходных порошков выступали порошки разного фазового состава: 1) порошок WC, полученный методом плазмохимического синтеза ($d_1 \sim 0.095$ мкм), 2) порошок WC производства АО «КЗТС» ($d_2 \sim 0.8$ мкм). ЭИПС осуществлялось до окончания усадки порошков на установке Dr. Sinter model SPS-625 (Syntex, Япония) в вакууме. Нагрузка составляла 70 МПа, скорость нагрева – 50°C/мин, температура окончания усадки порошков – 1520 и 1640°C соответственно. Из каждого порошка в идентичных условиях было изготовлено по три образца, которые далее исследовались на дифрактометре XRD-7000 (Shimadzu, Япония). Поверхность образцов подвергалась последовательной шлифовке алмазными дисками и полировке алмазными пастами, что позволило получить распределение фазового состава по глубине образцов. Исследование микроструктуры образцов проводилось на растровом электронном микроскопе JSM-6490 (JEOL, Япония).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках гранта №22-73-10175.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ ОТ УЛЬТРАТОНКИХ МЕТАЛЛ-ОКСИДНЫХ ПЛЁНОК

М.Б. Смирнов, А.В. Лубенченко, Д.А. Иванов, Д.С. Лукьянцев

Национальный исследовательский университет «МЭИ»
SmirnovMB@mpei.ru

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) позволяет получить значительную информацию об исследуемом образце: качественный, количественный и фазовый составы, толщину и послойный профиль. При проведении анализа РФЭС-спектров исследователи используют различные модели послойного профиля исследуемой плёнки [1]. Для корректной расшифровки экспериментальных РФЭС-спектров необходимо учесть все факторы, влияющие на получаемый спектр: неоднородность и многокомпонентность плёнки, немонохромность излучения, рассеяние электронов в плёнке. Численные модели энергетических спектров фотоэлектронов позволяют понять влияние вышеперечисленных факторов на вид экспериментального спектра.

В работе проводилось моделирование РФЭС-спектров от ультратонкой плёнки металл-оксидов с разными видами мишени: полубесконечного слоя, многослойной структуры с конечными размерами и островковой неоднородностью на поверхности плёнки. Разложение профиля РФЭС-линий проводилось по методу, приведённому в [2]. При моделировании учитывалось неупругое рассеяние электронов на поверхностном слое плёнки.

Разработана программа, моделирующая различные типы РФЭС-спектров многокомпонентной и многослойной металл-оксидной плёнки, с помощью которой возможно определить толщину островка и коэффициент заполнения по поверхности.

Литература.

1. A.V. Lubenchenko, D.A. Ivanov, O.I. Lubenchenko, et al. Non-destructive chemical and phase layer profiling of multicomponent multilayer thin ultrathin films // *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 1370, № 1, pp. 012048 (2019).
2. A.V. Lubenchenko, A.A. Batrakov, I.V. Shurkaeva, et al. Xps study of niobium and niobium-nitride nanofilms // *J. Surf. Invest. X-Ray*, vol. 12, № 4, pp. 692–700, 2018.

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ CO₂ НА МЕТОКСИЛИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ

С.А. Смирнов, Т.Р. Аминев*, Р.М. Меншарапов, Д.Д. Спасов, А.А. Цыганенко*

НИЦ «Курчатовский институт», segakarel@icloud.com

*Санкт-Петербургский государственный университет

Основной задачей при переходе на безуглеродную энергетику является уменьшение выбросов и уровня CO₂ в атмосфере земли. В настоящее время рассматриваются различные методы по удалению и переработке CO₂, в том числе сорбция на оксидах металлов [1,2]. Однако представленная в литературе методика проведения сорбции CO₂ требует уточнения для повышения ее эффективности, в частности возможно расширение ИК-диапазона до высокочастотного (выше 1700 см⁻¹) и применение новых метоксилированных оксидов.

В рамках работы исследованы адсорбенты для хранения и рецикла CO₂, такие как CaO, BeO, TiO₂ с метоксильными группами на их поверхности. Экспериментальная часть работы проводилась на ИК фурье-спектрометре Nicolet 510 с охлаждаемым приёмником (Nicolet МСТ-В).

Для проверки выдвигаемой теории адсорбции проведены расчёты по методу теории функционала плотности по гибриднему функционалу V3LYP с базисом 6-311+G(d).

Соотнесение расчётных частот колебаний на элементарных и усложнённых системах показали, что кислороды при химической адсорбции CO₂ присоединяются к металлу (титану), а кислород метоксильной приповерхностной группы связывается с углеродом CO₂. На основе экспериментальных данных можно утверждать, что на метоксильных группах оксида кальция адсорбция CO₂ происходит на гидроксильных группах поверхности.

Работа выполнена в НИЦ «Курчатовский институт» в рамках выполнения приказа №89 от 20.01.2023 по пункту 3п.2.5. «Разработка новых электрокаталитических материалов с улучшенными свойствами для электрохимических устройств с ТПЭ».

Литература.

1. А. А. Tsyganenko, E. A. Trusov. Zhurnal Fizicheskoi Khimii, 1985, 59, p. 2602-2603.

2. P. E. Hoggan, M. Bensite, J.C. Lavalley. *Journal of Molecular Structure*, 1994, 320, p. 46-56.

ЭЛЕКТРОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ В МАГНИТОТВЕРДЫХ ФЕРРИМАГНЕТИКАХ

М.В. Сошников, Е.А. Горбачев, Е.С. Козлякова, Л.Н. Алябьева*,
А. Асмаа*

МГУ имени М.В. Ломоносова, miroslav.soshnikov@yandex.ru

*МФТИ, лаборатория терагерцовой спектроскопии

Сегодня переход к сверхбыстрой электронике требует материалов с высокочастотной спиновой динамикой. В этом свете перспективными оказываются изоляторы, обладающие явлением естественного ферромагнитного резонанса (ЕФМР). На эту роль феррит кобальта, являющийся магнитотвёрдым ферримагнетиком при низких температурах, представляется наиболее подходящим кандидатом. Однако в литературе до сих пор нет как предложений по изготовлению спинтронного устройства, основанного на эффекте ЕФМР, так и данных об электронных резонансах CoFe_2O_4 .

Целью данной работы является синтез CoFe_2O_4 в виде наночастиц и керамики, а также исследование магнитостатических и магнитодинамических свойств данных материалов в зависимости от температуры измерений. Наночастицы CoFe_2O_4 со средним диаметром 5 - 20 нм получены путём кристаллизации ксерогеля $\text{CoFe}_2\text{O}_4/\text{SiO}_2$, полученного гидролизом тетраэтоксисилана в водно-спиртовом растворе Fe^{3+} и Co^{2+} , при температурах 900 – 1200 °С. Керамика CoFe_2O_4 с размерами кристаллитов около 4 мкм получена в процессе спекания CoCO_3 и Fe_2O_3 при температуре 1350 °С.

У однодоменных образцов широкие петли гистерезиса. Материалы обладают интенсивным резонансным поглощением на частотах выше 0,20 ТГц в отсутствие внешнего магнитного поля. Керамический образец демонстрирует самую высокую из известных частот ЕФМР - 0,35 ТГц. Для объяснения продемонстрированных магнитодинамических свойств была разработана модель, основанная на уравнении Ландау-Лифшица.

Расчёты спиновых токов показывают, что эти материалы должны обеспечивать на несколько порядков более мощную спиновую накачку на суб-ТГц/ТГц частотах по сравнению с антиферромагнитными изоляторами даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Это открывает новые горизонты для разработки практической сверхбыстрой электроники.

Исследование выполнено за счет гранта РФФ № 21-79-10184.

МНОГОСЛОЙНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ СО СТРУКТУРОЙ «НИТРИД ТИТАНА – ТИТАН – ОСНОВА»

М.А. Сударчикова, Е.О. Насакина, С.В. Конушкин, К. В. Сергиенко
М.А. Севостьянов, А. Г. Колмаков

Институт металлургии и материаловедения им. А. А.
Байкова РАН, mariahsudar@yandex.ru

Покрyтия, состоящие из нитрида титана, широко используется в аэрокосмической, морской промышленности, узлах трения в качестве износостойкого и коррозионностойкого материала, а также является перспективными в области медицины [1,2]. В данной работе представлена разработка композиционных материалов на основе из алюминийевого сплава Д16 и титанового сплава Ti-10Nb-3Mo с поверхностными слоями из титана, нитрида титана и многослойной композиции, состоящей из чередующихся слоев титана и нитрида титана для биомедицинского и трибологического назначения, полученные методом высоковакуумного магнетронного распыления на постоянном токе в инертной и реактивной средах. Структура и фазовый состав исследовались с помощью сканирующей электронной микроскопии, атомно-эмиссионной спектрометрии, рентгеновской дифрактометрии и зондовой микроскопии. Скорость формирования поверхностного слоя из чистого титана на подложке из сплава Д16 составляла около 180 нм/мин, а скорость синтеза поверхностного слоя из титана в реактивной среде значительно замедлялась и составляла не более 70 нм/мин из-за затравливания мишени азотом. Синтезированный нитрида титана на подслое из титана обладал большей концентрацией азота в составе - до 38% мас., чем при формировании нитрида на подложке при одинаковых параметрах осаждения, причем данный подслои позволяет формировать большую толщину слоя из нитрида титана, чем без подслоя, а также более насыщенный азотом поверхностный слой.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ No 21-79-10256.

Литература.

1. V.M. Savostikov, et al. Russ. Phys. J., 2022, 64, p. 2219-2224.
2. R. Del Castillo, et al., Journal of Prosthodontics, 2022, 31.7, p. 571-578.

ВОЗМОЖНОСТИ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ СИНТЕЗА И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЙ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ

М.В. Суясова, В.П. Седов, Д.Н. Орлова

НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, marina.suyasova@mail.ru

В настоящее время активно растет спрос на фуллерены и эндометаллофуллерены (ЭМФ) как на объекты с высоким потенциалом применений для биомедицины, электроники, информационных технологий и др. Так, эндометаллофуллерены гадолиния могут одновременно служить для фотодинамической терапии онкологических заболеваний, магнитно-резонансной и рентгеновской компьютерной диагностики [1,2]. А специально подобранные функциональные группы могут обеспечивать адресную доставку препаратов на основе ЭМФ в область патологии. Однако, несмотря на то, что за последние 30 лет уже проделана большая работа по разработке эффективных методик синтеза и выделения фуллеренов и эндометаллофуллеренов, до сих пор все еще нет легко масштабируемой технологии, позволяющей добиться селективности при выделении эндометаллофуллеренов и их производных, необходимой для надежной характеристики и трактовки наблюдаемых эффектов.

Данная работа обобщает результаты цикла исследований, посвященного разработке способов получения водорастворимых производных эндометаллофуллеренов, а также исследованию их строения, колебательных характеристик, физико-химических свойств и радиационной стойкости при облучении нейтронами и протонами энергией 100 МэВ и 1 ГэВ. Установлено, что производные эндофуллеренов, модифицированные гидроксильными группами, более стабильны при протонном и нейтронном облучении по сравнению с исходными эндофуллеренами, что весьма существенно при рассмотрении данных объектов как прототипов новых радиофармпрепаратов для терапии и диагностики онкологических заболеваний.

Литература.

1. O. Naruya, S. Hisanori, J. Chemistry & Chemical Industry, 2001, p. 59.
2. E. V Iezzi, J. C. Duchamp, J. Nano Letters, 2002. p. 11.

ПОВЕРХНОСТНАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ
ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В АМОРФНЫХ МИКРОПРОВОДАХ
СОСТАВА $Fe_{73,8}Si_{13}B_{9,1}Cu_1Nb_{3,1}$ и $Fe_{77,5}Si_{13,5}B_9$

Фукс А.А.1,2, Абросимова Г.Е.1, Аксенов О.И.1, Аронин А.С.1

1 – Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН,

2 – Национальный исследовательский университет "Высшая школа
экономики", artemfux@yandex.ru

В процессе изготовления микропроводов методом Улитовского–Тейлора расплав в стеклянной оболочке подвергается резкому охлаждению, что приводит к формированию аморфной структуры. Благодаря высокому градиенту температур и различию в коэффициентах термического расширения между металлической сердцевиной микропровода и стеклянной оболочкой индуцируются неоднородные по величине и характеру внутренние напряжения [1]. В частности, у поверхности микропровода действуют в основном сжимающие осевые напряжения, достигающие по величине единиц ГПа. При нагреве происходит образование нанокристаллов твердого раствора кремния в ОЦК-железе α -Fe(Si) [2], плотность которых выше, чем плотность аморфной матрицы [3]. Поэтому при кристаллизации отрицательный объёмный эффект будет являться причиной возникновения сжимающих напряжений между нанокристаллами и аморфной матрицей.

Образцы микропроводов состава $Fe_{73,8}Si_{13}B_{9,1}Cu_1Nb_{3,1}$ и $Fe_{77,5}Si_{13,5}B_9$ с удаленной стеклянной оболочкой подвергались термической обработке при температуре 753 и 703 К в течение 20 минут, после чего их структура исследовалась с помощью рентгенографии. Далее, приповерхностные области микропроводов удалялись при помощи химического травления, после чего снова проводилось рентгенографическое исследование структуры.

Полученные результаты свидетельствуют о преимущественной кристаллизации приповерхностных областей и рассматриваются с точки зрения механических напряжений на зарождение и рост нанокристаллов.

Литература.

1. H. Chiriac, T. A. Ovari, and G. Pop, Phys. Rev. B, 1995, 52, p. 10104 – 10113.
2. G. Herzer. Phys. Scripta 1993, T49A, p. 307.
3. R. Parsons, et al., J. Alloys Compd. 2021, 859, p. 157845.

ЭВОЛЮЦИИ УПРУГИХ СВОЙСТВ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В-ГЛИЦИНА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

М.А. Хайновский*

Институт катализа СО РАН, ma.khainovskiy@gmail.com
Новосибирский государственный университет

Квантово-химическое моделирование материалов в условиях высокого давления позволяет предсказывать их свойства. Наиболее полную информацию дает сочетание исследований с применением теории функционала плотности и экспериментов по рентгеновской дифракции.

В качестве объекта исследования выбрана одна из двух полиморфных модификаций глицина, обладающих пьезоэлектрическими свойствами, β -глицин, который широко используется в составе наноструктур и сенсоров. При давлении 0.76 ГПа в β -глицине наблюдается обратимый фазовый переход в β' -глицин с сохранением монокристалла. Известны координаты атомов в структурах этих фаз, но ни электронное строение, ни макроскопические характеристики не изучали. Цель данной работы - установить взаимосвязь между пьезоэлектрическими свойствами β -глицина и эволюцией электронной среды при повышении давления.

В программном пакете CRYSTAL17 проведено DFT-моделирование структуры кристаллов β -глицина в условиях гидростатического сжатия с учетом периодичности электронных волновых функций. Рассчитаны дескрипторы упругих свойств (программа ELATE). Изучены формирующие структуру материала H-связи, получены сведения о распределении электронов в критических точках H-связей. Обнаружено, что смещение молекулярных фрагментов при воздействии внешних сил затруднено вдоль молекулярных слоев, но при этом облегчено под углом к данным слоям. Слабые межмолекулярные взаимодействия обеспечивают податливость для сдвига слоев относительно друг друга, а более сильные связи обеспечивают значительное сопротивление сдвиговой деформации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ совместно Институтom катализа СО РАН (проект АААА-А21- 121011390011-4) и НГУ (Программа Приоритет-

2030) в Лаборатории МДЭБТ (НОЦ "Институт химических технологий") и на кафХТТ ФЕН НГУ.

Научные руководители - д-р физ.-мат. наук, проф. В.Г. Цирельсон,
д-р хим. наук, проф. Е.В. Болдырева

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ГОРЯЧЕГО ИЗОСТАТИЧЕСКОГО ПРЕССОВАНИЯ

И.М. Хачатурян, В.П. Леонов, Ю.Ю. Малинкина, Е.В. Чудаков

НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей»,
vleonov@crism.ru

В связи с потребностью создания изделий из титановых сплавов для морской техники сложной формы и с определенными свойствами, одним из перспективных и активно развивающихся технологий изготовления является метод горячего изостатического прессования [1]. При использовании мелкодисперсных порошков сферической формы изделия обладают более высокими эксплуатационными характеристиками [2].

Целью данной работы является исследование физико-механических свойств псевдо-альфа-титанового сплава, полученного методом горячего изостатического прессования, в сравнении с деформированным полуфабрикатом.

Характерная особенность компактированного металла – более однородная и мелкозернистая структура изделий по сравнению со структурой, свойственной полуфабрикатам больших сечений. Современная технология горячего изостатического прессования впервые применена на титановых сплавах морского назначения. Уровень механических свойств опытных изделий, произведенных методом ГИП из порошка, удовлетворяет требованиям нормативной документации. А произведенная оценка эксплуатационных характеристик при испытаниях на длительную прочность и малоцикловую усталость в сравнении с деформированным полуфабрикатом установила соизмеримость данных в пределах разброса свойств.

Литература:

1. Samarov V., Seliverstov D., Raison G., Goloveshkin V. Physical Principles of Shape and Densification Control during HIP // Proceedings of the 2011 International Conference on Hot Isostatic Pressing, Kobe, Japan. – 2011.
2. Александров А.В., Кузнецов С.Ю., Демченков Г.Г., Афонин Е.А. Перспективы дальнейшего развития и совершенствования гранульной металлургии // Титан. – 2015. – №3 – С. 39-41

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛА ЗОНЫ ТЕРМИЧЕСКОГО ВЛИЯНИЯ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СТАЛИ 15X2НМФА

О.Д. Чеботарёв*, Р.О. Полякова*, , А.А. Чернобаева*, Д.Ю. Ерак*,
Ю.Е. Песня*, В.В. Трофимчук*

*НИЦ «Курчатовский институт», chebotaryov_od@mail.ru

Исследование металла зоны термического влияния (ЗТВ) стали 15X2НМФА показало, что свойства металла ЗТВ существенно отличаются от свойств основного металла (ОМ) при неизменном химическом составе [1]. Свойства локальных областей ЗТВ также различаются по твердости и значениям критической температуры хрупкости [1]. Критическая температура хрупкости (T_k) области высокой твердости ЗТВ на 80°C ниже, чем для ОМ. В настоящей работе выполнены анализ структурных изменений в металле ЗТВ и результатов моделирования температурного цикла сварки.

Выявлены причины различий свойств. Снижение значений T_k связано с измельчением зерна и изменением типа структуры. Размер бывшего аустенитного зерна в локальной области с максимальными значениями твердости составляет 10–15 мкм. Размер зерна ОМ составляет ~100 мкм. Структура ОМ это в основном верхний бейнит отпуска. Как показал анализ термокинетических диаграмм стали 15X2НМФА, при скоростях охлаждения характерных для области высокой твердости ЗТВ в процессе $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения образуются структуры типа мартенсит и нижний бейнит. Поскольку сварное соединение подвергается высокому отпуску при 650°C, в исследуемой области образуются структуры мартенсит отпуска и нижний бейнит отпуска. Существенное влияние типа структуры на значение T_k ранее было показано в работе [2]. Дополнительно установлено, что при высоких скоростях нагрева, характерных для термического цикла сварки, интервал $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения смещается в область более высоких температур приблизительно на 170°C.

Литература.

1. А.А. Chernobaeva, D.Yu. Eрак, R.O. Polyakova, K.I. Medvedev and others, International Journal of Pressure Vessels and Piping 195, pp. 1-8 (2022).
2. Чернобаева А.А., Николаев Ю.А., Скундин М. А., Журко Д. А., Красиков Е. А., Медведев К. И., Костромин В.Н. и др., Атомная энергия. 2012;3(6):337–343.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РАСПЛАВА ПРИПОЯ СИСТЕМЫ ZrTiCuBe С КАРБИДОМ КРЕМНИЯ

Е.Р. Чернавская, И.В. Федотов, А.А. Иванников

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
ekat_rom_form@mail.ru

Карбид кремния SiC является перспективным материалом для применения в различных отраслях науки и техники, так как обладает набором привлекательных физико-химических свойств. Недостаток SiC – хрупкость, может быть исправлен созданием композитов SiC/SiC. Но современные технологии не позволяют создавать изделия больших размеров или сложной геометрии из композитного SiC. Эта проблема может быть решена при использовании метода пайки. В ранее проведенной работе показано, что с применением высокотемпературной пайки припоем $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ (ат. %) возможно получить надежное (прочность на срез 200 ± 60 МПа, при режиме пайки: $810\text{ }^{\circ}\text{C} - 10$ мин.) паяное соединение SiC/SiC, состоящее преимущественно из интерметаллидов (Zr,Ti)₂Cu, ZrBe₂, TiBe₂ [1].

В данной работе с использованием методов растровой электронной микроскопии, микрорентгеноспектрального и дифракции обратно-рассеянных электронов анализа изучен процесс формирования структурно-фазового состояния паяного шва SiC/ $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ /SiC в интервале температур $810-1450\text{ }^{\circ}\text{C}$ с временем выдержки 10 минут. При нагреве до $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ в TiBe₂ образуются трещины, вероятно, из-за несоответствия коэффициента линейного термического расширения (КЛТР) данной фазы и КЛТР карбида кремния. Нагрев до $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ приводит к образованию частиц новой фазы с соотношением элементов (Zr,Ti)/Si – 2:1, последующий нагрев до $1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ вызывает образование Zr₂Si. При нагреве до $1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ в паяном соединении происходит формирование реакционного слоя из карбосилицидов титана, что приводит к расслоению паяного соединения при охлаждении. Показано, что повышение температуры до $1300-1450\text{ }^{\circ}\text{C}$ создает условия для формирования шва, состоящего из силицида циркония ZrSi, карбосилицида титана Ti₃SiC₂ и карбидов TiC, ZrC, что согласуется с теоретическими значениями энергий Гиббса образования силицидов и карбидов титана и циркония.

Литература.

1. Active Brazing of Silicon Carbide with Rapidly Quenched TiZrCuBe Filler Metal / I.V. Fedotov, A.N. Suchkov, A.A. Ivannikov и др.// JMEPEG. – 2022. – p. 1 – 11.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭМИССИОННЫХ СВОЙСТВ ТУГОПЛАВКИХ МАТЕРИАЛОВ ПОСЛЕ ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ В УСТАНОВКЕ ПЛМ

М.С. Чилин^{1,2}, В.П. Будаев^{1,2}, С.Д. Федорович¹

¹ Национальный исследовательский университет "МЭИ", ОФиЯС

² НИЦ Курчатовский Институт, chilins2@gmail.com

Одним из негативных процессов, оказывающих влияние на эрозию материалов стенки и являющихся источником загрязнения плазмы в термоядерных установках, является процесс образования униполярных дуг (УД). УД преимущественно генерируются на шероховатых и неоднородных поверхностях, в том числе на вольфрамовых поверхностях типа «пух». Такие поверхности из слоев нановолокон диаметром 20-50 нанометров формируются при облучении вольфрама гелиевой плазмой [1].

В экспериментах на установке ПЛМ [1] были получены оптимальные условия (энергия ионов гелия и температура образца) для роста микро-наноструктур на вольфрамовых, железных и титановых поверхностях. В данной работе получены плотность тока эмиссии и коэффициент усиления электрического поля. Схема эксперимента представлена на рисунке 1 а. Результаты эксперимента в сравнении с данными работы [2] представлены на рисунке 1 б. Полученный ток электронной эмиссии может вызвать взрывную электронную эмиссию и эрозию, что необходимо учитывать при эксплуатации термоядерных установок.

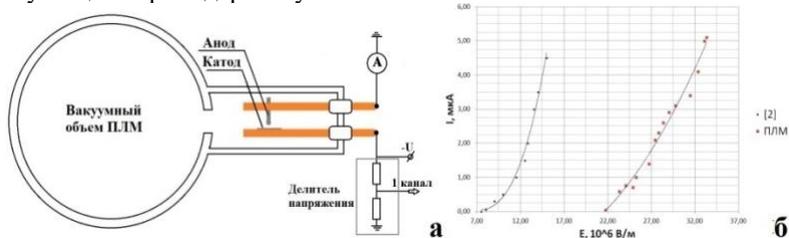


Рисунок 1 – схема эксперимента (а), ВАХ вольфрамового «пуха» (б)

Литература.

1. Будаев В.П. и др. ВАНТ сер. Термоядерный синтез. – 2017. –Т.40, №3. – С.35.

2. Hwangbo D. et al. IEEE Trans. Plasma Sci. – 2017. Vol. 45, No. 8. – P. 2080.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ ПРИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

В.В. Чиркова, Н.А. Волков, Е.А. Першина, Г.Е. Абросимова,
А.С. Аронин

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия,
valyffkin@issp.ac.ru

Интерес к частично-кристаллическим материалам, формируемым на основе аморфных сплавов системы Al-TM-RE (TM – переходный металл, RE – редкоземельный компонент) обусловлен их необычной структурой, которая определяет необычные физические свойства [1], отличающиеся от свойств традиционных материалов. Параметры структуры, образующейся в аморфных сплавах, определяются видом обработки (термической или механической) [2]. Методом рентгенографии и просвечивающей электронной микроскопии исследовано образование структуры в аморфных сплавах Al-Ni-(Gd,Y), подвергнутых термической обработке и деформации. Исследование показало, что на начальных стадиях кристаллизации при деформации и термообработке происходит образование гетерогенной аморфной фазы и кристаллов алюминия (рис. 1). Полученные результаты важны с точки зрения развития представлений о процессах кристаллизации аморфных металлических сплавов.

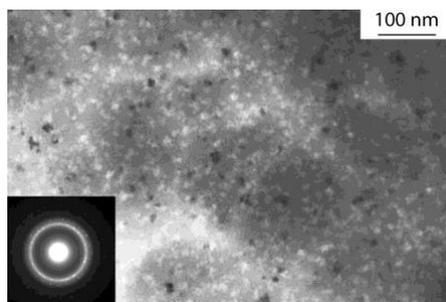


Рис.1. Структура сплава $Al_{87}Ni_8Gd_5$ после первой стадии кристаллизации

Литература.

1. D.V. Louzguine-Luzgin, A. Inoue, J. Alloys Comp., 399, 78 (2005).
2. A. Aronin, D. Matveev, E. Pershina, V. Tkatch, G. Abrosimova, J. Alloys Comp., 715, 176 (2017).

ОПИСАНИЕ ПОДХОДА К ИСПЫТАНИЮ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ, ВКЛЮЧАЮЩЕГО ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРОВНОСТИ КРАЯ ФОРМИРУЕМЫХ СТРУКТУР

А.А. Шарапов, Е.С. Горнев

АО «НИИМЭ», asharapov@niime.ru
МФТИ (НИУ), кафедра микро- и нанoeлектроники,
andrey.sharapov@phystech.edu

При формировании базовых микро- и наноразмерных структур микроэлектроники с помощью технологии литографии наблюдается явление неровности боковых поверхностей. Эффекты, вызванные неровностью структур и негативно влияющие на функциональные характеристики устройств, становятся всё заметнее при масштабировании проектных норм, связанных с развитием технологий производства интегральных схем [1]. Учитывать данный аспект необходимо и при разработке мер по повышению выхода годных и надёжности интегральных микросхем [2].

Предлагается метод испытания технологических процессов интегральной микроэлектроники, состоящий в статистическом исследовании флуктуационной картины распределения количественных характеристик неровности края наноразмерных структур с помощью повторных измерений, выполняемых в малой выделенной области пластины. Используются результаты сравнительного исследования подходов к оценке значений амплитуды неровности края наноразмерных структур [3].

Литература.

1. Красников Г.Я. Возможности микроэлектронных технологий с топологическими размерами менее 5 нм. Наноиндустрия. 2020. Т. 13. № S5-1(102). С. 13-19.
2. Горнев Е.С. Методы обеспечения надёжности современных СБИС, М.: Материалы II Международной конференции МММЭК. С. 13–21.
3. Шарапов А.А., Баранов Г.В. Сравнительный анализ методик оценки количественных характеристик шероховатости наноразмерных структур. Труды МФТИ. 2018. Т. 10, № 2 (38). С. 72–79.

ПРЕЦИЗИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ: ГАЛОГЕНИДЫ ИТТЕРБИЯ

В.М. Шахова, Д.А. Мальцев, Ю.В. Ломачук, А.В. Титов*

НИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ, shakhova_vm@npi.nrcki.ru

В настоящее время теоретические исследования кристаллов, содержащих лантаноиды, лимитируются возможностями современных квантовохимических методов, которые, как правило, ограничиваются теорией функционала плотности, скалярно-релятивистскими подходами для описания периодических структур и «мягкими» полулокальными псевдопотенциалами. Прецизионное исследование подобных структур на суб-нано (атомном) масштабе могло бы стать мощным инструментом, позволяющим оперативно решать множество фундаментальных и прикладных задач.

В представленной работе исследована электронная структура кристаллов с ионно-ковалентными связями - YbF_2 , YbF_3 , YbCl_2 , YbCl_3 . В ЛКХ НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ разработан комбинированный метод, использующий «подстраиваемые под соединение» псевдопотенциалы (compound-tunable pseudopotentials, СТПП) и потенциалы внедрения (compound-tunable embedding potential, СТЕР) [1-3], который позволяет решать такие задачи.

Показано, что модель фрагмента кристалла, построенная с помощью комбинированного метода, воспроизводит электронную плотность из периодических расчетов в окрестности атома Yb с очень высокой точностью.

Независимым критерием проверки точности воспроизведения электронной плотности фрагмента кристалла нами выбран анализ химических сдвигов линий рентгеновского эмиссионного спектра (ХС РЭС) на атоме Yb, как один из наиболее чувствительных методов к изменению заселенностей 4f-оболочки лантаноида.

Литература.

1. Yu.V. Lomachuk, et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, v. 22. p. 17922–17931.
2. D.A. Maltsev, et al., Phys. Rev. B., 2021, v. 103, p. 205105.
3. V.M. Shakhova, et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 2022, v. 24, p. 19333–19345.

ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ПОРОШКОВОГО МАГНИТОТВЁРДОГО СПЛАВА Fe-30Cr-16Co-1Sm

Е.В. Шустер, И.М. Миляев, В.С. Юсупов

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН

Проведена оптимизация термической обработки анизотропного порошкового магнитотвёрдого сплава Fe-30Cr-16Co-1Sm методом планирования эксперимента с использованием программных пакетов Statgraphics и Statistica. После оптимизации получены значения остаточной индукции Br 1,252 Тл, коэрцитивной силы HсВ 53,08 кА/м и магнитного энергетического произведения (ВН)макс 36,8 кДж/м³. Полученные уравнения регрессии зависимостей Br, HсВ и (ВН)макс от параметров термической обработки (времени выдержки при изотермической термомагнитной обработке (ИТМО), скорости охлаждения от температуры ИТМО до 5800С и скорости охлаждения от 580 до 5000С) описывают адекватно в пределах изменения выбранных параметров в соответствующих фазовых пространствах. Полученный уровень магнитных гистерезисных свойств сплава Fe-30Cr-16Co-1Sm превышает аналогичные свойства одного из самых распространённых промышленных сплавов ЮНДК24 (ГОСТ 17809-72) [1], при меньшем содержании кобальта более чем на 40%.

Литература.

1. ГОСТ 24897-81. Материалы магнитотвёрдые деформируемые. Марки, технические требования и методы контроля.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ СВОЙСТВ ВЫСОКОПРОЧНОЙ ХЛАДОСТОЙКОЙ СТАЛИ ДЛЯ СТРОИТЕЛЬСТВА ЛЕДОКОЛОВ ПОВЫШЕННОЙ МОЩНОСТИ

Е.А. Яковлева, М.В. Голубева, Е.И. Хлусова

НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей»,
npk3@crism.ru

В настоящее время осуществляется строительство атомного ледокола повышенной мощности «Лидер», который должен находиться в условиях круглогодичного плавания, преодолевать льды толщиной до четырех метров, ресурс судна должен составлять не менее 40 лет. Целью работы являлось обеспечение стабильности свойств хладостойкой стали с гарантированным пределом текучести 500 МПа, предназначенной для строительства ледоколов повышенной мощности.

Проведены исследования влияния режимов отпуска после закалки на структуру высокопрочной низкоуглеродистой бейнитно-мартенситной стали и ее склонность к деформационному старению.

Установлено, что для стали с мартенситно-бейнитной структурой при недостаточной продолжительности или температуре отпуска увеличивается склонность к деформационному старению. Это проявляется в повышении прочности и снижении пластичности, что может оказать влияние на технологичность стали в судокорпусном производстве.

Показано, что обеспечение требуемых прочностных характеристик в исследуемой стали происходит за счет выделения при высоком отпуске мелкодисперсных специальных карбидов ниобия, ванадия и молибдена, закрепляющих дислокационную структуру. Основным параметром отпуска, оказывающим наибольшее влияние на процессы карбидообразования и механические свойства стали является температура. Путем выбора режимов отпуска возможно обеспечить в листовом прокате из высокопрочной низкоуглеродистой стали требуемый предел текучести со значениями работы удара не ниже 80 Дж при температуре испытаний минус 80 °С.

Разработанные технологии изготовления листового проката толщиной до 60 мм из хладостойкой стали с гарантированным пределом текучести 500 МПа позволили обеспечить строительство ледоколов «Арктика», «Сибирь», «Урал» с мощностью атомной энергетической установки 60 Мвт и ледокола «Лидер» (120 МВт).

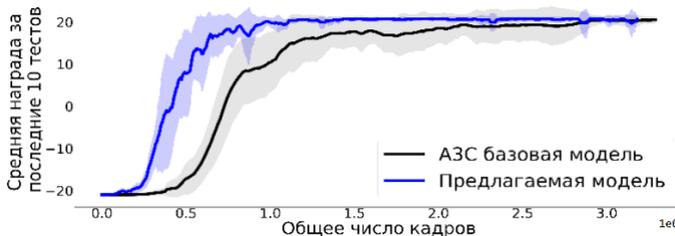
Секция 4.
Информационные технологии и системы

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ОБУЧЕНИЯ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ АСИНХРОННОГО АКТОРА-КРИТИКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВАРИАЦИОННОГО АВТОЭНКОДЕРА

А.В. Андроненко, В.А. Демин, И.А. Молошников

НИЦ Курчатовский Институт, andronenko.andrey@bk.ru

Несмотря на достигнутые впечатляющие успехи, современные методы обучения с подкреплением по-прежнему характеризуются невысокими надежностью и воспроизводимостью, связанными с проблемами редкой награды и «проклятия размерности» многомерной среды. В настоящей работе в развитие идей, изложенных в [1], предлагается введение регуляризатора решения целевой задачи нейросетевым алгоритмом с архитектурой асинхронного актора-критика (АЗС [2]) в виде дополнительной функции потерь вариационного автоэнкодера, обеспечивающей стабильный полезный поток обучающего градиента и структурирование внутреннего представления агента. На примере игры «Теннис» из тренировочного набора сред «Атари» показано, что такая регуляризация позволяет ускорять обучение и достигать максимальной награды за эпизод с использованием в 3 раза меньшего количества тренировочных данных:



Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

Литература.

1. Shelhamer E. et al. Loss is its own reward: Self-supervision for reinforcement learning., arXiv preprint arXiv:1612.07307, 2016.
2. Mnih V. et al. Asynchronous methods for deep reinforcement learning., International conference on machine learning. PMLR, 2016., С. 1928-1937.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ BCR-ABL ТИРОЗИНКИНАЗЫ

Д.А. Воробьев, А.Д. Карпенко

Государственное научное учреждение «Объединенный институт проблем информатики», Национальная академия наук Беларуси,
daniel.vorobiov.2002@yandex.ru

Проблема высокой смертности онкологических заболеваний является крайне актуальной в наше время. В нашей работе была поставлена задача нахождения потенциальных лекарственных препаратов против одной из самых распространенных разновидностей лейкоза - хронического миелоидного лейкоза (ХМЛ). В работе осуществлен поиск потенциального ингибитора BCR-ABL тирозинкиназы (PDB ID: 3OXZ; <https://www.rcsb.org>) - фермента, играющего важную роль в патогенезе ХМЛ.

Для идентификации потенциальных ингибиторов BCR-ABL тирозинкиназы нами была применена процедура виртуального скрининга. В ходе обработки структуры белка были заполнены пробелы в его аминокислотной последовательности, удалены кристаллизованные молекулы воды, добавлены недостающие атомы водорода и комплекс был минимизирован по энергии.

Виртуальный скрининг был проведен на веб-сервисе Pharmit (<https://pharmit.csb.pitt.edu/>) с учетом правила Липински [1]. Три фармакофорные модели были сформированы в результате сравнительного анализа ингибиторов BCR-ABL тирозинкиназы понатиниба (PDB ID: AP24534) и иматиниба (PDB ID: STI571), нилотиниба (PDB ID: AMN107), понатиниба (PDB ID: AP24589) для мутантной Bcr-Abl тирозинкиназы (PDB ID: T315I).

В результате работы была составлена виртуальная библиотека на 2321 молекулярных соединений, а также проведен анализ полученных библиотек соединений и выделена наиболее перспективная фармакофорная модель.

Литература.

1. Lipinski C. A., Lombardo F., Dominy B. W., Feeney P. J. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings

(англ.) // Adv. Drug Deliv. Rev.: journal. — 2001. — March (vol. 46, no. 1—3). — P. 3—26.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ОБРАБОТКЕ ИЗОБРАЖЕНИЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ

А.В. Бузмаков, А.Ю. Григорьев

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, grigartu@gmail.com

Обработка проекций рентгеновской микротомографии решает целый спектр задач по удалению артефактов и позволяет улучшить качество изображения с сохранением при этом объективности экспериментальных данных. В качестве инструмента для обработки проекций были выбраны генеративные нейронные сети, которые показали хорошие результаты в области научных данных, в том числе обработки рентгеновских изображений на синхротронных источниках и XFEL изображений [1].

В нашей работе была исследована применимость различных генеративных нейросетевых архитектур и их вариаций для предобработки проекций рентгеновской микротомографии. Численно оценена погрешность и проведено сравнение с применяемыми на данный момент методами.

Литература.

1. Buakor K. et al, Optics Express., 2022, p. 10633-10644.

О ТОЧНОСТИ МЕТОДОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ COVID-19 В РОССИИ НА ДОСТУПНЫХ ДАННЫХ 2020-2022 ГОДОВ

С.В. Завертяев*, И.А. Молошников, Р.Б. Рыбка, А.Г. Сбоев**

НИЦ Курчатовский Институт, zavertyaev.sv@phystech.edu

* Московский Физико-Технический Институт "МФТИ"

** Национальный Исследовательский Ядерный Университет "МИФИ"

Возможность предсказания количества случаев заболевания Covid-19 потенциально позволяет заблаговременно распределять нагрузку на больницы и планировать региональные контрмеры с целью уменьшить летальность. Модель на основе LSTM, обученная на статистике заболеваний по регионам России и штатам США, продемонстрировала лучшую точность [1] на всех горизонтах прогноза в сравнении с базовыми моделями, моделями на основе популяционной динамики, машинного обучения и моделями на основе экспоненциального сглаживания.

Данная работа фиксирует текущий уровень точности на данных с марта 2020 до конца 2022 года для России. Статистика регионов взята с сайтов проектов Yandex.Datalens и John Hopkins Coronavirus Research Center. Рассматриваются несколько подходов, отобранных по результатам предыдущих исследований [1-2]: 1) на основе рекуррентной нейронной сети типа LSTM (Long-Short Term Memory), обучающейся на данных всех регионов, 2) базовой модели (завтра как сегодня) и 3) модели на основе экспоненциального сглаживания.

В соответствии с предыдущими работами для оценки точности используется процедура кросс-валидации с накоплением: весь временной интервал делится на несколько равных частей, из которых собираются тренировочные и тестовые множества. Ошибка измеряется на тестовых частях всех регионов по метрикам MAPE и MAE. Рассмотрены горизонты предсказания 14, 28, 42 дня и проведен анализ результатов.

Литература.

1. Moloshnikov I. A. et al. On the accuracy of Covid-19 forecasting methods in Russia for two years //Procedia Computer Science. – 2022. – Т. 213. – С. 428-434.

2. Sboev A. G. et al. Strict baselines for Covid-19 forecasting and ML perspective for USA and Russia //arXiv preprint arXiv:2207.07689. – 2022.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ

Т.Д. Войтко, А.Д. Карпенко, К.В. Фурс

Государственное научное учреждение «Объединенный институт проблем информатики», Национальная академия наук Беларуси,
rfe.karpenko@gmail.com

Применение методов искусственного интеллекта в био- и хемоинформатике, а также в медицинской химии позволило ускорить процесс создания новых лекарственных препаратов и повысить эффективность программ фармацевтических исследований [1]. При использовании данных методов был разработан гетероэнкодер для генерации потенциальных ингибиторов BCR-ABL тирозинкиназы (PDB ID: 3OXZ; <https://www.rcsb.org>) и её мутантной формы тирозинкиназы (PDB ID: T315I). На основе ингибиторов BCR-ABL тирозинкиназы уже создан ряд лекарственных препаратов для лечения первой линии хронического миелоидного лейкоза.

В результате работы гетероэнкодера были получены химические структуры 1 117 молекул, которые очищали от дубликатов, проверяли на валидность, интерпретируемость и содержание 2-ариламинопиримидина с помощью модуля RDKit (<http://www.rdkit.org/>). На заключительном этапе с помощью программы AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>) проводили молекулярный докинг 1 083 успешно прошедших проверку соединений с рентгеновскими структурами Bcr-Abl тирозинкиназы. Молекулярный докинг проводили в приближении жесткого рецептора и гибких лигандов с помощью программы AutoDock Vina (<https://vina.scripps.edu>).

Полученная выборка соединений после их ранжирования по значениям оценочной функции AutoDock Vina составила 569 молекул, проявляющих высокое сродство к АТФ-связывающим сайтам Bcr-Abl тирозинкиназы и её мутантной формы.

Показано, что совместное использование гетероэнкодера и молекулярного докинга формирует продуктивную базу для генерации базовых структур, перспективных для создания новых противоопухолевых препаратов, ингибирующих острые стадии развития миелоидного лейкоза.

Литература.

1. Lipinski C.F., Maltarollo V.G., Oliveira P.R., da Silva A.B.F., Honorio, K.M. Advances and Perspectives in Applying Deep Learning for Drug Design and Discovery. Front. Robotics and AI. 2019; 6: 108.

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСНОГО ПОДХОДА К СЕГМЕНТАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНО-ОДНОРОДНЫХ РЕГИОНОВ ДЛЯ АНАЛИЗА КОГНИТИВНОЙ АКТИВНОСТИ НЕЙРОНАЛЬНЫХ СЕТЕЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА ЧЕЛОВЕКА ПО ДАННЫМ фМРТ

С.О. Козлов, А.А. Пойда

НИЦ Курчатовский Институт, manist@list.ru

За последние несколько десятков лет человечество сильно продвинулось в понимании принципов функционирования головного мозга человека. Огромную роль в этом играют неинвазивные методы исследования, в частности магнитно-резонансная томография (МРТ), используемая для анализа анатомической структуры головного мозга, и функциональная МРТ (фМРТ), используемая для анализа когнитивной активности.

В исследованиях с использованием данных фМРТ критическую роль играет определение регионов, в которых анализируется когнитивная активность головного мозга. Особый интерес представляют функционально однородные регионы (ФОР) головного мозга, все элементы которых имеют схожую когнитивную активность. На текущий момент нет подходов, позволяющих по данным фМРТ сегментировать ФОР: наиболее часто регионы определяются в соответствии со структурно-функциональными атласами.

В данной работе предложен новый метод сегментации пространственно-связанных непересекающихся функционально однородных регионов по данным фМРТ с возможностью выбора уровня однородности регионов [1,2]. Метод состоит из трёх основных шагов. На первом шаге определяются функционально однородные регионы с центром в каждом вокселе (полученные регионы могут пересекаться). На втором шаге из дальнейшего рассмотрения удаляются регионы, центры которых перекрываются регионами большего размера (это позволяет сегментировать регионы максимального размера, оставшиеся регионы всё ещё могут пересекаться). На третьем шаге производится окончательное распределение вокселей между регионами по принципу лучшей корреляции. Разработанный метод реализован в виде программного комплекса на языке MATLAB и доступен для скачивания по адресу <https://github.com/KozlovStanislav/CCM-FOR>.

Тестирование на синтетических и на экспериментальных данных, полученных на МР-томографе SIEMENS Magnetom Verio 3T на базе НИЦ «Курчатовский институт», показало, что выделяемые разработанным методом регионы обладают более высоким уровнем однородности по сравнению с регионами, определёнными в соответствии со структурно-функциональными атласами.

Апробация разработанного метода на данных фМРТ, полученных в состоянии покоя, показала, что наиболее устойчивые связи образуют регионы, входящие в сеть DMN, что соответствует общепринятым гипотезам.

Разработанный метод был использован в рамках решения задачи выделения признаков патологии шизофрении по данным фМРТ, что повысило точность разделения групп с использованием метода опорных векторов на 8-11% по сравнению с аналогичными исследованиями [3], использующими структурно-функциональные атласы.

Литература.

1. Kozlov, S., Poyda, A., Orlov, V., Sharaev, M., Ushakov, V. (2021). Selection of Functionally Homogeneous Human Brain Regions for Functional Connectomes Building Based on fMRI Data. *Advances in Intelligent Systems and Computing*, 1358 AIST, 709–719
2. Kozlov, S., Poyda, A., Orlov, V., Malakhov, D., Ushakov, V., & Sharaev, M. (2020). Selection of functionally homogeneous brain regions based on correlation-clustering analysis. *Procedia Computer Science*, 169, 519–526
3. Guo, W., Su, Q., Yao, D., Jiang, J., Zhang, J., Zhang, Z., ... Xiao, C. (2014). Decreased regional activity of default-mode network in unaffected siblings of schizophrenia patients at rest. *European Neuropsychopharmacology*, 24(4), 545–552. doi:10.1016/j.euroneuro.2014.01.004

ТЕХНОЛОГИИ ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ В ПРОЕКТИРОВАНИИ АСММ

А.М. Карпович, О.Д. Комарова, М.Э. Шестаков

НИЦ Курчатовский Институт, Komarova_OD@nrcki.ru

Атомные станции малой мощности (АСММ) предназначены для надежных поставок электроэнергии, тепла и воды, а также способствуют развитию экономики и социальной сферы в удаленных регионах с локальными энергоисточниками [1]. Проекты АСММ относят к инновационным, в которых реализуются преимущества судовых атомных технологий и учитываются требования потребителей и условия размещения [2].

На примере АСММ типа «Елена» создана цифровая модель проекта с применением технологий виртуальной реальности (VR). Возможность цифрового присутствия в VR и взаимодействия разработчиков проекта позволила получить полную информацию об объекте, оценить компоновку, организацию монтажных и ремонтных работ. Такой подход обеспечил оперативность апробирования различных проектных решений, возможность их сопоставления на реалистичной модели с выявлением потенциальных проблем и последующей оптимизацией. Это существенно сократило трудозатраты и время на разработку проекта на стадии выбора схемно-компоновочных и объемно-планировочных решений.

Кроме того, при проектировании АСММ VR-технология будет играть важную роль в организации оперативного взаимодействия между участниками проекта на единой платформе. После создания объекта цифровая модель найдет применение в части поддержки эксплуатации и обучения персонала по различным сценариям.

Литература.

1. Инновационная атомная энергетика малых мощностей для нефтегазовых промыслов на Арктическом шельфе / Е.П. Велихов, В.Ф. Демин, Н.Ш. Исаков [и др.] // Энергия: экономика, техника, экология. – 2016. – № 7. – С. 17-23.
2. Никитин В.С., Половинкин В.Н., Симонов Ю.А., Устинов В.С., Кузнецов В.П., Макаров В.И. Атомная энергетика в арктическом регионе // Арктика: экология и экономика. – 2015. – № 4 (20). – С. 86 – 95

РАЗРАБОТКА МЕТОДА СЖАТИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ ЗЕМНОЙ ПОВЕРХНОСТИ НА ОСНОВЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ПО БАЗИСУ СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ СУБПОЛОСНЫХ МАТРИЦ

Е.Г. Жилияков, И.И. Лубков, Д.И. Трубицына

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, кафедра информационно-телекоммуникационных систем и технологий, zhilyakov@bsu.edu.ru

Изображения земной поверхности (ИЗП) в настоящий момент служат важным источником информации во многих управленческих процессах, от отслеживания жизненных циклов сельскохозяйственных культур, до контроля лесных пожаров и прочих чрезвычайных ситуаций. В цифровой форме изображения представляются определенным образом сформированным набором бит, позволяющим воспроизвести их при помощи программно-аппаратных средств. При передаче и хранении ИЗП возникает задача экономии ресурсов каналов связи и хранилищ цифровых данных, решаемая за счет уменьшения их битовых представлений. Такое уменьшение называют сжатием и реализуют на основе соответствующих методов, среди которых, наибольшее распространение получили JPEG и JPEG2000. Данные методы основаны на частотных представлениях изображений, применяя Фурье и вейвлет преобразования [1-2]. Однако, известным недостатком данных методов является приближенное вычисление доли энергии сигнала в некотором ограниченном частотном диапазоне, что в свою очередь, не позволяет в полной мере учесть свойства концентрации энергии ИЗП в подобных частотных интервалах. В данном докладе представлен метод сжатия изображений, основанный на частотных представлениях, реализуемых с применением базиса собственных векторов субполосных матриц, позволяющего точно определять энергию заданных диапазонов частот [3].

Литература.

1. Гонсалес Р. Вудс Р. Цифровая обработка изображений. Издание 3-е М.: Техносфера, 2012, с. 1104.
2. Дворкович В.П., Дворкович А.В., Цифровые видеoinформационные системы (теория и практика) М.: Техносфера, 2012, с. 1008.

3. Жилияков Е.Г., Черноморец А.А., Вариационные алгоритмы анализа и обработки изображений на основе частотных представлений Белгород: Изд-во ГИК, 2009, с. 146.

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА МЕТОДОВ ГЕНЕРАЦИИ ОТЗЫВОВ НА ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ПРЕПАРАТЫ С ПОМОЩЬЮ RUGPT3-XL

А.А. Михайлова, И.А. Молошников, Р.Б. Рыбка

НИЦ Курчатовский Институт, mihailovaanastasia9@gmail.com

Информация в интернете не всегда достоверна, в частности, отзывы на лекарственные препараты могут быть сгенерированными. Для поиска подобных отзывов необходим набор как реальных, так и сгенерированных текстов. Сгенерированные тексты должны быть мало отличимы от написанных людьми, поэтому для наилучшей генерации необходима методика оценки качества.

В работе предложен метод оценки качества генерации отзывов на лекарственные препараты. Рассмотрены сочетания 5 видов затравок и 3 стилей генерации. Затравки построены на основе Russian Drug Review corpus[1],[2]. Генерация отзывов производилась с помощью модели ruGPT3-XL[3].

Для оценки сгенерировано по двадцать отзывов на каждое сочетание типа затравки и стиля генерации, подобрано 4 критерия, которым должны соответствовать сгенерированные тексты, проведена ручная валидация, в результате которой максимально полученный балл — 44 по шкале от 0 до 80. В данном случае сгенерированные отзывы наиболее похожи на реальные, что позволяет использовать данный метод генерации для дальнейшего создания набора данных.

Методика будет использоваться при разработке системы поиска сгенерированных отзывов на лекарственные препараты, генерации отзывов для последующей разметки, пополнения выборки.

Литература.

1. RDRS [Электронный ресурс] // GitHub. URL: <https://github.com/sag111/RDRS>
2. Sboev A. et al. Analysis of the full-size russian corpus of internet drug reviews with complex ner labeling using deep learning neural networks and language models //Applied Sciences. – 2022. – Т. 12. – №. 1. – С. 491.
3. ruGPT3XL [Электронный ресурс] // GitHub. URL: <https://github.com/ai-forever/ru-gpts>

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ХРАНЕНИЯ И ПОИСКА
БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИ-ЗНАЧИМЫХ СВОЙСТВ
МИКРООРГАНИЗМОВ

П.С. Деменков, С.А. Лашин, А.М. Мухин

Курчатовский геномный Центр Института Цитологии и Генетики СО
РАН, mukhin@bionet.nsc.ru

Описание, систематизация и анализ биологических данных являются важными задачами, которые стоят перед исследователями. Используя данные из определенных биологических уровней, начиная с молекулярно-генетического и заканчивая экологическим, можно исследовать объект всесторонне и максимально полно. Базы данных и знаний могут помочь в достижении этих задач и ускорить исследовательскую работу, однако реализация и развертывание этих систем являются нетривиальными задачами.

Работа посвящена разработке системы анализа и хранения гетерогенных данных, описывающих бактериальные штаммы.

Был создан программный комплекс, состоящий из пяти компонентов: хранилища исходных данных, вычислительного конвейера для анализа геномных данных, системы индексации результатов анализа, веб-интерфейса и REST-контроллера.

Программный комплекс базируется на следующем стеке технологий: языки программирования Python, Bash (для реализации вычислительного конвейера и вспомогательных скриптов для индексации); фреймворки Spring Boot (REST-контроллер) и Vue.JS (веб-интерфейс), СУБД PostgreSQL (система индексации).

Данный программный комплекс позволяет решать задачи поиска штаммов микроорганизмов, содержащие определенные метаболические пути KEGG, промышленно-значимые гены и/или относящиеся к заданной таксономии.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ВЫСОКОПЛОТНЫХ ИНГИБИРОВАННЫХ ЗАРЯДОВ

М.Ю. Немцев

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, nemtsev@niisi.ras.ru

В работе построена математическая модель конвективного горения высокоплотного заряда (ВЗКГ), ингибированного пленкой поливинилбутирала (ПВБ). Газопороховая смесь моделируется двухфазной неравновесной гетерогенной средой, состоящей из многокомпонентной газовой фазы продуктов горения заряда и пленки, и полидисперсной конденсированной фазы элементов заряда. В процессе конвективного горения выделены стадии воспламенения пленки в порах, пиролиза оставшейся части пленки в соответствии с эмпирической функцией разгара [1] и горения заряда по полной поверхности. Проведено численное исследование горения высокоплотного заряда в цилиндрической установке со сбросом давления. Рассматривались заряды, спрессованные до объемных долей 0.77, 0.885, 0.916 изготовленные из семиканальных пороховых элементов с одинаковым содержанием ингибитора. На основе экспериментальных данных по фильтрации азота в образцах заряда построена аппроксимация для описания силового межфазного взаимодействия. В качестве характерного размера выбран диаметр эквивалентных по площади цилиндрических каналов. Рассмотрены предельные случаи открытых и закрытых каналов в результате прессования заряда, определяющие полную поверхность зерна. Результаты моделирования сравниваются с экспериментальными данными по задержкам прохождения волны конвективного горения внутрь заряда и динамике роста давления. Также продемонстрирована зависимость результатов расчета от параметров модели. Полученные данные позволяют предположить, что прессование заряда до наибольшей из рассматриваемых объемных долей приводит к перекрытию каналов с отсутствием горения по их поверхности. Расчеты проводились на кластере “МВС-10П” МСЦ РАН.

Литература.

1. Б.С. Ермолаев, А.А. Сулимов, А.А. Беляев, А.В. Романьков, В.С. Посвянский, Химическая Физика, 2001, т. 20, № 1, с. 84–93.

РАЗВИТИЕ ИНСТРУМЕНТОВ ДЛЯ ВЫСОКОТОЧНОГО РЕЛЯТИВИСТСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ И СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ АКТИНИДОВ

А.В. Зайцевский*, Н.С. Мосягин, А.В. Олейниченко,
Л.В. Скрипников**, А.В. Титов**, Э. Элиав***

НИЦ Курчатовский Институт – ПИЯФ, oleynichenko_av@npri.nrcki.ru

* Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

** Санкт-Петербургский государственный университет

*** Тель-Авивский университет, Израиль

Соединения актинидов являются одними из наиболее сложных объектов для высокоточного моделирования методами квантовой химии ввиду сильных релятивистских эффектов, многоконfigurационного характера их электронных состояний и очень высокой плотности уровней в спектрах.

В настоящей работе представлены новые инструменты для высокоточного моделирования подобных систем, разработанные в Лаборатории квантовой химии НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ: релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока и его реализация – пакет программ EXP-T [1], библиотека LIBGRPP для расчёта молекулярных интегралов с обобщёнными релятивистскими псевдопотенциалами [2], новые подходы к вычислению интенсивностей электронных переходов. С помощью этих технологий было проведено моделирование электронных состояний (в том числе, возбуждённых) молекул AcF, ThO, UO₂, UF₆, получена информация о структуре и характеристиках спектров этих молекул. На качественно новом уровне выполнено отнесение линий электронного спектра молекулы UO₂. Построена количественная модель электронно-колебательного спектра молекулы AcF, открывающая возможности планирования экспериментов по лазерной резонансной ионизационной спектроскопии этой молекулы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-72-10019, <https://rscf.ru/project/19-72-10019/>.

Литература.

1. A. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, E. Eliav, Commun. Comp. Inf. Sci., 1331, 375 (2020).
2. A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii, N.S. Mosyagin, A.N. Petrov, E. Eliav, A.V. Titov, Symmetry, 15(1), 197 (2023).

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ПРЕДОБРАБОТКИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МРТ-ДАННЫХ

В.А. Орлов, М.С. Орлов

НИЦ Курчатowskiй Институт, orlov.mse@yandex.ru

Активно происходит цифровая трансформация в Российской Федерации. Внедряются современные технологии аппаратных исследований, в том числе при помощи магнитно-резонансной томографии. МРТ-исследования проводятся, главным образом, в рамках диагностики онкологии, внутренних травм, сердечно-сосудистой системы и, в том числе, когнитивных функций и состояний. Ключевыми этапами последних являются: сбор данных томографии, предварительная обработка и дальнейший анализ. И второй направлен, в первую очередь, на устранение артефактов сканирования, и далее приведение данных к формату, подходящего для последующего анализа. На этом этапе пользователи вынуждены программировать собственные алгоритмы обработки, обращаясь, зачастую, к нескольким нетривиальным в освоении программным пакетам. Поэтому мы создали программу для полностью автоматизированной предварительной обработки функциональных МРТ-данных. Лаконичный удобный в использовании интерфейс и система «выбери данные – нажми на кнопку – жди результат» позволяют пользователям любой квалификации быстро переходить к дальнейшим исследованиям с достижением необходимого качества данных. Программа была написана на языке Python, базируется на пакете Nipype, обладает GUI, позволяет провести обработку и получить численные оценки качества результатов. Предлагается на выбор несколько алгоритмов обработки, подходящих для разных задач, также имеется возможность внедрения пользовательских. В целях повышения удобства и доступности использования рассматривается внедрение программы в виде библиотеки в Цифровую лабораторию Курчатowskiго института, создание облачного интерфейса для работы с ней, а также интеграция с программными инструментами дальнейшей обработки.

О ПЕРСПЕКТИВНОЙ ПЛАТФОРМЕ АНАЛИЗА БЕЗОПАСНОСТИ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПОТОКОВ В АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

И.Г. Рыжов

Российский университет дружбы народов (РУДН), Инженерная академия, ryzhov.ilgen@gmail.com

Доверие к автоматизированным системам (АС) во многом зависит от реализации методов защиты информации. Для обеспечения безопасности информации в процессе ее обработки могут применяться подходы, в основе которых лежит контроль информационных потоков (КИП). В докладе описывается платформа PLIF анализа безопасности информационных потоков в АС, обладающая рядом преимуществ над другими существующими механизмами КИП.

Литература.

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023612168. Анализ трасс проигрывания TLC моделей, построенных на основе TLA+ спецификаций программных блоков баз данных и приводящих к нарушению инварианта безопасности информационных потоков / Тимаков А.А., Рыжов И.Г., Лысиков А.В. Заявка № 2022686784 от 30.12.2022; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 30.01.2023. – 1 с.
2. Тимаков А.А. Контроль информационных потоков в программных блоках баз данных на основе формальной верификации, Программирование, 2022, № 4, с. 27–49.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СИНАПТИЧЕСКИХ ВЕСОВ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ РАЗМЕЩЕНИЯ НА ЦИФРОВОМ НЕЙРОПРОЦЕССОРЕ

Р.Б. Рыбка^{1,3}, А.Г. Сбоев^{1,2}, А.В. Серенко^{1,3}, А.О. Софонов³

¹ НИЦ Курчатовский Институт, serenko@phystech.edu

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

³ ООО «Мотив НТ»

Нейроморфные вычислительные архитектуры позволяют достигать значительно — до 3 порядков — меньшего энергопотребления по сравнению с графическими процессорами (GPU) при реализации нейронных сетей. Однако существующие цифровые нейропроцессоры налагают несколько ограничений на синаптические веса размещаемой нейронной сети: веса должны быть 8-битными целыми числами, и входящие веса каждого нейрона могут принимать не более определённого количества уникальных значений. В данной работе сравниваются два способа преобразования синаптических весов обученной нейронной сети к значениям, удовлетворяющим данным ограничениям.

Оба способа основаны на дообучении сети методом обратного распространения ошибки, в ходе которого при вычислении выходных активаций нейронов веса заменяются модифицированными. В первом способе модификация при дообучении состоит в том, что веса квантуются в 7-битные целые, а после дообучения каждый нейрон заменяется несколькими, чьи веса имеют не более заданного количества уникальных значений, выбранных так, чтобы выход этих нейронов был эквивалентен выходу исходного нейрона. Во втором способе в ходе дообучения веса кластеризуются в заданное число кластеров и заменяются центрами соответствующих кластеров, а затем квантуются в 8-битные целые.

На примере задачи классификации городских шумов UrbanSound при обоих способах получена точность в 57% (по метрике F1), что на 3% меньше исходной нейронной сети прямого распространения с тремя скрытыми слоями. При этом при первом способе каждый нейрон исходной сети заменяется 5 нейронами, а при втором способе каждый нейрон использует ресурсы трёх нейронов в ядре нейропроцессора.

Литература.

1. Quantization and training of neural networks for efficient integer arithmetic-only inference / Benoit Jacob et al. // Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. — 2018. — P. 2704–2713.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕКСТУРНЫХ ПРИЗНАКОВ НА ОСНОВЕ ФУРЬЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ РАЗЛИЧИЙ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Е.В. Поляков, Д.О. Сурконт

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
dinasurkont@yandex.ru

Одной из актуальных задач в сфере обработки медицинских изображений является классификация. Данные изображения различных типов имеют выраженные структурные различия, что позволяет использовать текстурные признаки для их разделения. Существует множество подходов для анализа текстуры, один из них основан на использовании Фурье преобразования [1].

Большинство работ посвящено вычислению суммарной спектральной энергии в пределах круглых или клиновидных частотных областей [2]. Признаки, рассчитанные в круглых сегментах, могут быть эффективны для анализа различных текстур, так как в них содержится информация о распределении энергии в высокочастотной или низкочастотной области, тогда как использование клиновидных областей не инвариантно к повороту изображения. Исходя из этого для анализа текстур были использованы кольцевые сегменты.

В работе предложена новая методика вычисления признаков, основанная на расчёте площади, занимаемой областью спектра со значениями больше заданного порога. Такой подход позволяет проанализировать выраженность пиков в частотных областях. Кроме того, если совместить данный подход с кольцевыми сегментами, можно получить информацию о примерной локализации этих пиков в виде нескольких текстурных признаков.

Литература.

1. Mollazade K. et al. Analysis of texture-based features for predicting mechanical properties of horticultural products by laser light backscattering imaging //Computers and electronics in agriculture. – 2013. – Т. 98. – С. 34-45.
2. Tang X., Stewart W. K. Optical and sonar image classification: wavelet packet transform vs Fourier transform //Computer vision and image understanding. – 2000. – Т. 79. – №. 1. – С. 25-46.В. Quesnel, P. Mora, Phys. Rev. E 58, 3719 (1998).

МОДЕЛЬ СЛЕДОВАНИЯ НА БАЗЕ ОБУЧЕНИЯ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ, УЧИТЫВАЮЩАЯ ДИНАМИКУ ИЗМЕНЕНИЯ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

Р.Б. Рыбка¹, А.Г. Сбоев^{1,2}, В.А. Шейн¹

¹ НИЦ Курчатовский Институт, sag111@mail.com

² Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Ключевой задачей управления движением является создание моделей, учитывающих динамику изменения внешней среды. Решение этой задачи требует построения ресурсозатратных моделей. Для их отработки была построена упрощенная 2D среда, в которой реализованы ведущий и ведомый агент, с возможностью установки различных сенсоров (лидар, радар и т.д.), алгоритмы движения и построения маршрутов, статические и динамические препятствия [1]. Динамическое препятствие обладает различными вариантами движения: вокруг ведущего, позади ведущего по траектории змейка и произвольный режим.

Была построена RL модель следования на основе базовой конфигурации признаков лучевого сенсора с 7 лучами, описанная в предыдущей работе [2]. Модель содержит следующие модификации: лучевой сенсор строит вокруг агента безопасный коридор следования, 12 лучей определяющие расстояния до коридора или ближайшего препятствия, а также, 30 лучей с длиной 4 метра для определения расстояния до динамического препятствия.

Модель обучалась в конфигурации среды с 35 статическими препятствиями, 2 динамическими препятствиями с траекторией движения вокруг ведущего. Для оценки качества модели было выбрано 100 тестовых маршрутов различной сложности, а в качестве критерия использовалось количество пройденных маршрутов. В результате, полученная модель прошла 81 маршрут из 100, что превосходит на 19 маршрутов результат базовой конфигурации без динамических препятствий.

Литература.

1. Selivanov A. et al. //Procedia Computer Science. – 2022. – Т. 213. – С. 209-216.
2. Грязнов А. В. и др. Вестник МИФИ. – 2022. – Т. 11. – №. 2. – С. 143-152.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕКУРРЕНТНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ РАСЧЁТА ИЗМЕНЕНИЯ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА ТОПЛИВА РЕАКТОРА ВВЭР-1000

Р.А. Внуков, Н.П. Шлапак

ИАТЭ НИЯУ МИФИ, nikitashlapak04@gmail.com

Знания об изотопном составе топлива в реакторе представляют большую ценность как с точки зрения эксплуатации реактора, так и для планирования этапов переработки и захоронения после завершения кампании. В связи с этим актуальной является задача моделирования нейтронно-физических процессов, происходящих в активной зоне при работе реактора.

Для этого принято использовать специальные расчётные коды, в частности, «SERPENT» [1], предлагающий использовать для этого метод Монте-Карло.

У детерминистических методов существует проблема точности получаемых решений, у статистических подходов по отношению к сложным и объёмным расчётам недостаток в скорости работы и требование больших вычислительных мощностей. Альтернативой могут стать нейросетевые алгоритмы, лишённые данного изъяна и обладающие преимуществом в простоте восприятия результатов [2]. Для реализации такого подхода будет использоваться рекуррентная нейросеть собственной разработки. Она будет прогнозировать содержание 29 изотопов в топливе и значение k_{∞} дискретно во времени при различном начальном обогащении и содержании гадолиниевого поглотителя в твэгах.

В качестве данных для обучения использовались результаты заранее проведённых с помощью «SERPENT» расчётов.

Литература.

1. Внуков Р.А., Колесов В.В. и др. Влияние размещения выгорающего поглотителя на нейтронно-физические характеристики тепловыделяющей сборки ВВЭР-1200//Известия вузов. Ядерная энергетика, - Обнинск, 2020 2.
2. Иваницкая Е.С., Лескин С.Т., Шлапак Н.П. Анализ состояния активной зоны реактора ВВЭР-1000 по показаниям СВРК с использованием нейросетевых алгоритмов//Техногенные системы и экологический риск, - Обнинск: 2022

**Секция 5.
Ядерная медицина**

НАРАБОТКА ^{135}La , КАК ПРОДУКТА РЕАКЦИИ ОБЛУЧЕНИЯ ^{136}Ba ПРОТОНАМИ

Т.В. Богомолова, И.А. Хоменко

НИЦ Курчатовский Институт
Московский физико-технический институт "МФТИ"

На сегодняшний день наработка ^{135}La является важной технической задачей. Благодаря испусканию Оже-электронов [2], использование ^{135}La в качестве терапевтического агента в тераностической паре к ^{133}La или ^{132}La [1] открывает новые возможности в ядерной медицине.

В данной работе изучалась реакция на ядрах ^{136}Ba под действием протонов с целью получения и дальнейшей очистки ^{135}La . Был проведен эксперимент по облучению мишеней на циклотроне У-150 (НИЦ «Курчатовский институт») методом стопки фольг с начальной энергией протонов 30 МэВ. Тонкие мишени с толщиной 5-5,5 мг/см² были изготовлены путем седиментации $^{136}\text{BaCO}_3$ из ацетона с добавлением коллодия в качестве связующего вещества. С помощью гамма-спектрометрии были получены энергетические спектры для каждой облученной мишени, что позволило рассчитать сечения реакций $^{136}\text{Ba}(p,x)^{135}\text{La}$, $^{136}\text{Ba}(p,x)^{135m}\text{La}$, которые хорошо согласуются с данными, опубликованными в TENDL-2021 [3]. Для очистки целевого изотопа ^{135}La была проведена хроматография на смоле TRU. Выход лантана составил более 80%.

Литература.

1. Bryce J. V. Nelson, High yield cyclotron production of a novel $^{133/135}\text{La}$ theranostic pair for nuclear medicine, J. Scientific Report, 2020, p.22203.
2. J. Fonslet, ^{135}La as an Auger-electron emitter for targeted internal radiothera, J. Scientific Report, 2018, p.015026.
3. A.J. Koning, J. Nuclear Data Sheets, 2019, p.1-55.

СИСТЕМА ДОЗНО-АНАТОМИЧЕСКОГО ПЛАНИРОВАНИЯ PROTOPLAN

Л.Г. Ваганян, А.И. Халиков, Ф.А. Пак

НИЦ Курчатовский Институт – «ПИЯФ», vaganyan_lg@npi.nrcki.ru

ProtoPlan является русскоязычной компьютерной программой для планирования стереотаксической радиохирургии протонами методом напролёт [1], имеющей трёхмерный подход. Данная система планирования разработана в соответствии с программой модернизации медицинского протонного комплекса Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова [2] и предназначена для расчёта и оценки прогнозируемой дозы [3], а также определения в соответствии с задаваемыми дозными нагрузками оптимальных параметров пучка и лечебной установки на базе синхроциклотрона СЦ-1000.

Основные отличия ProtoPlan от современных аналогов заключаются в подходах, обусловленных выбором методики лучевой терапии, техники доставки пучка излучения, а также непосредственно характеристик пучка и терапевтической установки, которая требует использования изоцентрической техники облучения в сочетании с поворотами элементов конструкции относительно стационарного пучка.

Система планирования ProtoPlan имитирует применение протонов на УПСТ для лечения интракраниальных мишеней (до 2 см³), позволяет более точно определить окончательные результаты стереотаксической радиохирургии и помогает оптимизировать дозу излучения, получаемую во время терапии, тем самым повышает эффективность лечения и снижает вероятность возникновения ошибок.

Литература.

1. Иванов Е.М., и др. Статус и перспективы развития протонной стереотаксической терапии на синхроциклотроне НИЦ КИ ПИЯФ СЦ-1000, М.: КВАЗАР, 2018, стр. 82.
2. N. Kuzora, et al., Book of abstracts, R9, Herceg Novi, Montenegro. P. 276. DOI: 10.21175/rad.abstr.book.2021.35.2.
3. Васильев А.А. и др. Расчёт глубинных дозных распределений, создаваемых пучком протонов с энергией 1000 МэВ при ротационном облучении. Мед.физ., № 4, 2020, стр. 5-11.

БОР-ПРОТОН-ЗАХВАТНАЯ ТЕРАПИЯ КАК ВОЗМОЖНЫЙ МЕТОД ЛЕЧЕНИЯ ГЛИОМ

А.В. Гарина^{1,2,4}, Т.А. Штам^{1,2,3}, В.С. Бурдаков^{1,2}, Л.А. Гараева^{1,2,4},
А.В. Волницкий^{1,2}, Е.А. Куус^{1,4,5}, Д.А. Амерканов^{1,2}, Ф.А. Пак^{1,2},
Г.И. Андреев⁵, А.И. Любинский⁵, К.А. Шабалин^{1,2}, Н. А. Верлов^{1,2},
Е.М. Иванов¹, В.Ф. Ежов¹, Д.В. Лебедев^{1,2}, А.Л. Коневега^{1,2,4}

НИЦ Курчатовский Институт, garina_av@npi.nrcki.ru

¹Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

НИЦ Курчатовский Институт

²НИЦ Курчатовский Институт

³Институт Цитологии РАН

⁴Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра
Великого

⁵Центр протонной терапии МИБС

Идея бор-протон-захватной терапии появилась как одно из возможных решений повышения биологической эффективности протонной терапии. В основу механизма предполагалось взять ядерную реакцию захвата протонов атомами бора-11 ($^{11}\text{B} + p \rightarrow 3\alpha + 8,7 \text{ МэВ}$) [1]. Были получены некоторые экспериментальные доказательства эффективности такого подхода на клетках аденокарциномы простаты и рака молочной железы [2]. Целью этого исследования была оценка радиосенсибилизирующих свойств боркаптата натрия (BSH) при облучении протонами на пике Брэгга клеточных линий глиом.

Клетки двух линий глиом, предварительно инкубировали с 80 ppm или 160 ppm бора-11, облучали как в середине модифицированного пика Брэгга (SOBP) с энергией 200 МэВ, так и в конце SOBP с энергией 89,7 МэВ и оценивали жизнеспособность и колониобразование. Кроме того, мы повторили эксперименты, используя клеточную линию аденокарциномы простаты DU145. Наши результаты показывают, что BSH обеспечивает лишь незначительное, если такое наблюдается, усиление эффекта протонного облучения на клетки глиом *in vitro*. Наши данные добавляют новый аргумент против эффективности бор-протон-захватной терапии.

Литература.

1. D. Yoon, et al., Appl. Phys. Lett., 2014, 105, p. 223507.
2. G. A. P. Cirrone, et al., Sci. Rep., 2018, 8(1), p. 1141.

ПОЛУЧЕНИЕ ^{165}Er И ^{167}Tm ОБЛУЧЕНИЕМ ^{167}Er ПРОТОНАМИ

А.М. Зефирова*, И.А.Хоменко, Е.С. Кормазева

НИЦ Курчатовский Институт, zefirova.am@phystech.edu

*Московский физико-технический институт "МФТИ"

Увеличение количества применяемых радионуклидов является одной из задач ядерной медицины. Это необходимо для реализации новых подходов в терапии и диагностике и персонализированного подхода, что предполагает разнообразие химических форм РФП.

Был проведён один эксперимент для изучения продуктов реакции $^{167}\text{Er}(p,x)$. Тонкие мишени были приготовлены из $^{167}\text{Er}_2\text{O}_3$ методом осаждения. Конструкция была собрана по методу стопки фольг. Облучение проводилось на изохронном циклотроне У-150 (НИЦ «Курчатовский институт») со стартовой энергией протонов 30 МэВ. Продукты реакций на отдельном слое фиксировались путём гамма-спектрометрических измерений на спектрометре с германиевым детектором.

По полученным результатам измерений были рассчитаны сечения для $^{167}\text{Er}(p,x)^{165,166,167}\text{Tm}$, которые согласуются с теоретической моделью базы данных TENDL-2021 [4] и ранее опубликованными данными, значительно расширив исследованный диапазон [3].

Из образовавшихся изотопов наиболее интересными для медицины являются ^{167}Tm и ^{165}Er . ^{167}Tm может быть использован в комбинированной медицинской диагностике и терапии [1], ^{165}Er – в Оже-электронной терапии [2]. Относительно них были подобраны условия облучения и конфигурация мишени конструкции.

Проведено хроматографическое выделение ^{167}Tm из облучённой мишени. Выход ^{167}Tm составил более 60%.

Литература.

1. R. Heinke, et al., *Frontiers in Medicine*, 2021, p. 1-17.
2. F. Tárkányi, et al., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2008, p. 3346–3352.
3. F. Tárkányi, et al., *Applied Radiation and Isotopes*, 2010, p. 250–255.
4. Koning, A. J., et al., *Nuclear Data Sheets*, 2019, p.1-55.

КОМПЛЕКСЫ МЕДИ И ИТТРИЯ С АЦЕТАТНЫМИ И ПИКОЛИНАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ

Л.С. Замуруева, И.С. Иконникова, А.В. Пашанова*, А.А. Щукина*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, кафедра радиохимии,
ikonnikova1999.i.s@gmail.com

* ИНЭОС РАН имени А.Н. Несмеянова

Изотопы меди и иттрия обладают высоким потенциалом для применения в ядерной медицине. Одним из подходов для улучшения стабильности комплексов с катионами является введение в структуру хелатора ацетатных и пиколинатных фрагментов. В связи с чем в качестве объектов исследования были выбраны комплексы катионов Cu^{2+} и Y^{3+} с ациклическим лигандом L1, а также с азакраун-эфирами с пиколинатными и ацетатными группами (лиганды L2 и L3)

В данной работе методами спектрофотометрического и потенциометрического титрования были уточнены стехиометрии и константы устойчивости комплексов лигандов L1-L3 с Cu^{2+} и Y^{3+} . Лиганды L1 и L2 с катионами Cu^{2+} образуют комплексы со стехиометрией 1/1 и 1/2, а больший по размеру катион Y^{3+} образует только мооядерные комплексы.

Были получены меченые $^{88/90}\text{Y}$ комплексы иттрия и ^{64}Cu комплексы меди с L1-L3. Определены оптимальные концентрации лигандов для получения меченых соединений, исследована устойчивость данных комплексов в конкурентной среде сывороточных белков и среде катионов микроэлементов. Для ^{64}Cu LiCuL2 были проведены эксперименты *in vivo*, а также исследована устойчивость в присутствии фермента супероксиддисмутазы.

L1 является ациклическим и высокоосновным, шесть карбоксильных групп с жесткими донорными атомами кислорода в его структуре не позволяют эффективно связывать пограничные по теории ЖМКО катионы Cu^{2+} . Однако комплекс с более жесткими катионами Y^{3+} устойчив в среде сывороточных белков по истечении суток. L2 с пиколинатными фрагментами, содержащими как жесткие донорные атомы кислорода, так и более мягкие атомы азота пиридина, образует устойчивый комплекс с катионами Cu^{2+} . L3 имеет схожую структуру с L1, однако, является макроциклическим, что положительно сказывается на устойчивости образуемых комплексов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №18-73-10035.

ИЗМЕРЕНИЕ СЕЧЕНИЙ РЕАКЦИИ $^{153}\text{Eu}(\alpha, \text{xn})$ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ МЕДИЦИНСКИХ ИЗОТОПОВ ТЕРБИЯ

А.К. Илющенко*, А.Н. Моисеева, Е.С. Кормазева

НИЦ Курчатовский Институт, ilyushchenko.ak@phystech.edu
*Московский Физико-Технический Институт (Государственный университет)

В данной работе проводилось исследование реакции под действием альфа-частиц на ядрах европия-153. Эксперимент проводился методом стопки фольг со стартовой энергией 60 МэВ, конечной - 41 МэВ. В качестве тонких слоев с ^{153}Eu использовались титановые фольги толщиной 2 мкм, на которые методом электроосаждения были нанесены слои оксида европия толщиной около 220 мкг/см². Для мониторинга тока использовались алюминиевые фольги и реакции $^{nat}\text{Al}(\alpha, \text{x})^{22,24}\text{Na}$. Продукты реакций в каждом тонком слое определялись путем серий гамма-спектрометрических измерений.

По результатам эксперимента были получены сечения реакций $^{153}\text{Eu}(\alpha, \text{xn})^{155,154,153,152}\text{Tb}$. Экспериментальные данные для этих реакций получены впервые. Они были сопоставлены с данными теоретического моделирования, опубликованными в базе TENDL-2021 [1]. Были рассчитаны выходы реакций.

Среди образовавшихся изотопов тербия особый интерес для медицины представляют ^{152}Tb – в качестве β^+ -эмиттера в ПЭТ [2], а ^{155}Tb – в ОФЭКТ [3]. Также каждый из них является тераностической парой к терапевтическому ^{161}Tb .

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект 075-15-2021-1360).

Литература.

1. Koning, A. J., et al., Nuclear Data Sheets, 2019, P. 1–55.
2. Baum R.P. et al., Dalt. Trans, 2017, P. 14638–14646.
3. Filosofov D., et al., Med. Biol. Elsevier Inc., 2021, P. 1–19.

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ВИСМУТА ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ К РАКОВЫМ КЛЕТКАМ С ГИПЕРЭКСПРЕССИЕЙ Her2

Короткова Н. А.1,2, Котельникова П.А.2, Кабашин А.В.1, Деев С.М.
1,2

¹ Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
korotkovaha@yandex.ru

² Институт биоорганической химии имени академика М.М. Шемякина-
Овчинникова РАН

Благодаря высоким коэффициентам поглощения в широком диапазоне длин волн и высокой эффективности фототермического преобразования наночастицы (НЧ) Вi могут применяться для радио- и фотосенсибилизации [1,2]. В ходе работы было опробовано покрытие наночастиц силан-полиэтиленгликолем-СООН. Полимер стабилизировал наночастицы в воде и фосфатно-солевом буфере. В качестве поверхностного опухолевого маркера был выбран рецептор HER2 [3]. Для доставки висмута к опухолевым клеткам поверхность наноструктуры модифицировали нацеливающими агентами: антителом Трастузумаб и каркасными белками DARPin и аффибоди. Карбоксильная группа полимера способствовала присоединению аминокислотной группы белка-мишени. Методом проточной цитометрии определено специфичное связывание нацеленных НЧ Вi с клетками со сверхэкспрессией HER2. Полученные МТТ-тестом значения токсичности позволяют заключить, что даже покрытые полимером НЧ Вi являются токсичными. Эти данные необходимо учитывать при расчете вводимого агента при *in vivo* исследованиях.

Литература.

1. Bulmahn J. C. et al. Laser-ablative synthesis of stable aqueous solutions of elemental bismuth nanoparticles for multimodal theranostic applications // *Nanomaterials*. – 2020. – Т. 10. – №. 8. – С. 1463.
2. Shahbazi M. A. et al. The versatile biomedical applications of bismuth-based nanoparticles and composites: therapeutic, diagnostic, biosensing, and regenerative properties // *Chemical Society Reviews*. – 2020. – Т. 49. – №. 4. – С. 1253-1321.
3. Mitri Z., Constantine T., O'Regan R. The HER2 receptor in breast cancer: pathophysiology, clinical use, and new advances in therapy // *Chemotherapy research and practice*. – 2012. – Т. 2012.

ФОРМИРОВАНИЕ РАДИОРЕЗИСТЕНТНОГО ФЕНОТИПА КЛЕТОК ЛИНИИ АДЕНОКАРЦИНОМЫ ЭРЛИХА В СЕРИИ ОБЛУЧЕНИЙ В ГАММА-УСТАНОВКЕ 60СО

Бурдаков В.С., Верлов Н.А. Гулина Л.С., Кулаков И.А.

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ,
ignaty2000@mail.com

Лучевая терапия (ЛТ) является одним из основных методов терапии злокачественных опухолей. Важнейшим препятствием, наряду с системными эффектами ЛТ, является изменение фенотипа опухолевых клеток в сторону уменьшения их чувствительности к ионизирующему излучению (ИИ). Подобный сдвиг является следствием исходной гетерогенности опухоли и режимов фракционированного облучения ЛТ.

Механизмы, обуславливающие формирование радиорезистентного фенотипа, в настоящее время, малоизучены. Концепция, долгое время считавшаяся основной, в рамках которой радиорезистентность формировалась вследствие мутаций, индуцированных повреждением ДНК под влиянием ИИ, не объясняет феномен радиорезистентности клеток опухоли, наблюдаемый в клинической практике. Разработка модели радиорезистентности на клетках в эксперименте *in vivo* и *in vitro* позволит не только получить объект для разработки оптимальных режимов ЛТ, но и выявить изменения, происходящие в клетке.

В нашем исследовании в серии последовательных облучений клеток линии аденокарциномы Эрлиха в гамма-установке для радиационных исследований РХ-γ-30(ВО «Изотоп») проводилась оценка выживаемости и перевиваемости клеток после облучения дозами 10 Гр, 20 Гр, 30 Гр, 40 Гр (мощность дозы 1.2 Гр/мин.). Аденокарцинома Эрлиха – клеточная линия, которая при внутрибрюшинной перевивке аутбредным лабораторным мышам ICR (CD-1) способна формировать асцитную опухоль. Объем асцита, получаемого от одной мыши, составляет до 10 мл, с концентрацией клеток в асците $10^9 - 10^{10}$ клеток в мл. Объем клеточного материала, получаемого от одного животного, позволяет проводить весь спектр исследований для характеристики радиорезистентных свойств исследуемой субпопуляции клеток (ЛД50, кривая доза-выживаемость) и изменений, относительно исходной популяции клеток, которые могли обусловить формирование этих свойств. В

настоящее время, получена субпопуляция клеток, сохранивших жизнеспособность после облучения дозой 40 Гр, а также клетки, сохранившие способность к перевивке после облучения дозой 30 Гр. В дальнейшем планируется оценка биофизического и биохимического профиля, анализ изменений в протеоме и метаболоме полученных субпопуляций клеток.

ВЫЯВЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕЙСТВИЯ ИОНОВ ^{12}C
УСКОРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ИФВЭ НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ
ИНСТИТУТ»

А.А. Мельникова, Д.А. Балдов, Л.Н. Комарова*

ИАТЭ НИЯУ МИФИ, отделение биотехнологий
angelik_melnikova@mail.ru

* Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Физической особенностью протонных и углеродных пучков является уменьшенный уровень облучения нормальных тканей, окружающих опухоль [1]. На данный момент насчитывается порядка 70 центров адронной терапии. Однако внедрение в практическое здравоохранение ионной терапии осуществляется медленнее, чем протонной. Первые клинические случаи лечения пучками тяжелых ионов относятся к 1950-1960-м годам и были осуществлены в Национальной лаборатории им. Лоуренса в Беркли [2].

Цель нашего исследования состояла в изучении эффективности пучка ионов ^{12}C по сравнению с гамма-излучением ^{60}Co . Объектами исследования являлись клеточные линии: MCF-7, Hela, HUH-7, SK-N-BE(2), hTERT, HEK-293.

Облучение ионами ^{12}C проводили на ускорителе У-70 Института физики высоких энергий (ИФВЭ) ФГБУ ГНЦ РФ «Курчатовский институт» (г. Протвино). Облучение осуществлялось в водном фантоме со средней энергией 450 МэВ/ нуклон. Средняя ЛПЭ излучения на начальном участке составила 11 кэВ/мкм, в пике 120-140 кэВ/мкм. Источником стандартного излучения служила гамма-установка радиационного облучения «ГУР-120» (источник ионизирующего излучения ^{60}Co , Еср = 1,25 МэВ). Мощность дозы – 0,9 Гр/мин. Дозы облучения: 1, 2, 4 Гр для злокачественных и нормальных клеток.

В рамках экспериментальной работы выявлены закономерности взаимодействия плотно- и редкоионизирующего излучений, а также установлена относительная биологическая эффективность действия ионов ^{12}C при однократном облучении на нормальных и опухолевых клетках.

Литература.

1. Ярмоненко С.П., Вайнсон А.А. Радиобиология человека и животных М, Высшая школа, 2004. с.549.
2. Клёнов Г.И., Хорошков В.С. Адронная лучевая терапия: история, статус, перспективы, УФН, 2016, с. 891–911.

ВЕРИФИКАЦИЯ ФИЗИКО-ДОЗИМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Г.В. Мерзликин^{1, 2}, В.О. Сабуров¹

¹ Медицинский радиологический научный центр имени А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, grishamerzlikin@gmail.com

² Институт ядерных исследований Российской академии наук
Метод Монте-Карло сейчас является самым распространённым инструментом для решения задач связанных с взаимодействием излучения с веществом и транспортом частиц в различных средах [1]. Программный пакет TOPAS MC [2] дополняет и упрощает использование известного пакета GEANT4. TOPAS MC, изначально разработанный для проведения симуляций в области протонной терапии, имеет понятный и простой интерфейс, удобный для повседневного использования медицинскими физиками. При работе с программами, нацеленными на такие точные вычисления, всегда важно грамотно задавать входные данные пучка, геометрические параметры системы и физическую модель, которая будет влиять на проявление или же наоборот пренебрежение теми или иными процессами.

В TOPAS MC имеется конкретный перечень параметров пучка, которые определяют его однозначно. Нами разработана серия дозиметрических проверок, позволяющая с достаточной точностью определить данные параметры. Такая математическая модель позволяет с высокой достоверностью описать вывод пучка на КПП «Прометеус», что необходимо для верификации дозиметрических измерений.

В работе представлено сравнение тестового плана на примере изодозных карт из системы планирования «Прометеус» и изодозных карт, построенных по результатам симуляции в TOPAS MC с пучками из этого плана. Также приведены сравнения данных симуляции с дозиметрическими измерениями в водном фантоме.
Список литературы:

1. Г.В. Мерзликин, С.В. Акулиничев, И.А. Яковлев // Моделирование протонной лучевой установки в программном пакете TOPAS MC // Вестник МГУ, серия физическая // 2023
2. J. Perl, J. Shin, J. Schümann, B. Faddegon, H. Paganetti TOPAS: An innovative proton Monte Carlo platform for research and clinical applications// Med Phys// 2012 Nov

ВАЛЕНТНОСТЬ И КООРДИНАЦИОННОЕ ОКРУЖЕНИЕ ИОНОВ Се В ЦЕРИЙ-ЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОКСИАПАТИТАХ

Ю.О. Никитина, Н.В. Петракова, А.А. Егоров, О.В. Баранов,
В.С. Комлев*

ИМЕТ РАН, nyo.94@yandex.ru

* Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН

В настоящее время внимание исследователей направлено на разработку новых остеопластических материалов с функциональной активностью, с целью усиления процессов регенерации костной ткани и сокращения сроков реабилитации пациента. Настоящая работа направлена на замещение ионов кальция (Ca) в структуре гидроксиапатита (ГА) на ионы церия (Ce), с целью придать материалу специфические свойства. Известно, что ГА в своей структуре содержит Ca в двух кристаллографических положениях, которые имеют разные окружения и расположены к замещению различными катионами. В физиологических условиях ионы Ce могут находиться в двух состояниях Ce(III) и Ce(IV) с радиусами 1,07 и 0,97 Å, соответственно. Ионный радиус Ca(II) в структурах ГА варьируется от 1,00 до 1,18 Å, в зависимости от КЧ. Актуальным вопросом является определение валентности а также координационного окружения иона Ce, в процессе получения керамики на основе церий-замещенного ГА (Ce-ГА).

Валентное состояние ионов Ce в порошках и керамики на основе Ce-ГА, полученных при различных условиях термической обработки, оценивали по интенсивности люминесцентного свечения материала и подтверждали при помощи рентгеновской спектроскопии XANES [1, 2]. По результатам ЭПР-исследований предложено координационное окружение Ce(III) в порошках и керамики Ce-ГА.

Автор выражает благодарность за помощь в проведении исследований д.х.н. Козюхину С.А. (ИОНХ РАН), к.ф.-м.н. Рогачеву А.В. и к.ф.-м.н. Тригубу А.Л. (НИЦ «Курчатовский институт»), д.ф.-м.н. Гафурову М.Р. (КФУ).

«Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00640, <https://rscf.ru/project/23-23-00640/>»

Литература.

1. N.V. Petrakova, et al., J. Phys. Conf. Ser., 2021, p. 012036.
2. Yu.O. Nikitina, et al., Russ. J. Inorg. Chem., 2021, p. 1067–1072.

ПРИМЕНЕНИЕ РАДИОХРОМНЫХ ПЛЕНОК EBТ2 ДЛЯ СТЕРЕОТАКСИЧЕСКОЙ РАДИОХИРУРГИИ НА БАЗЕ СЦ-1000

Пак Ф.А., Ваганян Л.Г., Халиков А.И.

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”-
ПИЯФ, pakfedor123@gmail.com

В 1975 году в НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ (бывшем ЛИЯФ) разработали методику лечения, основной особенностью которой являлись протоны высокой энергии 1000 МэВ. Главной спецификой протонов столь высокой энергии является тот факт, что излучение не будет останавливаться в тканях и будет проходить облучаемый объект насквозь, теряя малую часть энергии. Учитывая все особенности – высокую энергию протонов и отсутствие возможности ротации пучка вокруг пациента, методику можно применять только на новообразованиях головного мозга. Данная терапия была осуществлена 1395 пациентам. [1]

В рамках модернизации систем контроля качества лечения, встал вопрос о системе верификации дозиметрических планов. Ранее, для верификации использовалась термолюминесцентная дозиметрия. В фантоме размещалась пластина с термолюминесцентными детекторами (ТЛД). По завершении облучения, с каждого ТЛД снимались данные и сравнивались с дозиметрическим планом лечения в выбранных контрольных точках. В виду большого количества ТЛД, процедура занимала много времени. Каждую ТЛД необходимо нагреть до определенной температуры и записать данные. [2]

В качестве альтернативы верификации с помощью ТЛД выступили радиохромные пленки, из-за их широкого применения в клинической практике. В данной работе будут рассмотрено поведение радиохромных пленок при облучении протонами с энергией 1000 МэВ, а также возможность их применения для верификации дозиметрических планов

Литература.

1. А.М. Granov et al. 2013, Voprosy onkologii. 59. P. 465–469
2. N.K. Abrosimov et al. 2006, J. Phys.: Conf. Ser. **41** 424

СНИЖЕНИЕ УРОВНЯ НЕЙРОВОСПАЛЕНИЯ ПОСЛЕ ГАММА-ОБЛУЧЕНИЯ ГОЛОВЫ МЫШЕЙ С ПОМОЩЬЮ ЭКЗОСОМ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК

О.В. Высоцкая, А.С. Жирник, А.А. Парфёнова, М.Г. Ратушняк

НИЦ «Курчатовский институт», Parfyonova_AA@nrcki.ru

Повреждение клеток головного мозга при нейродегенеративных заболеваниях, травмах головы и воздействии ионизирующего излучения при лучевой терапии опухолей приводит к активации клеток микроглии и астроцитов, повышенной секреции ими провоспалительных цитокинов TNF α , IL-1 β , IL-6 и хемокинов и развитию хронического нейровоспаления, что сопровождается повреждением нейронов и, как следствие, появлением когнитивных нарушений. Возможность уменьшения уровня пострадиационного нейровоспаления и предупреждения отдаленных когнитивных нарушений с использованием экзосом нейральных стволовых клеток мыши была показана нами ранее. Целью настоящей работы было исследование влияния экзосом мезенхимальных стволовых клеток (МСК) жировой ткани мыши на уровень экспрессии генов провоспалительных цитокинов как молекулярных маркеров нейровоспаления в гиппокампе мышей после однократного гамма-облучения головы.

С помощью дифференциального ультрацентрифугирования из культуральной среды, кондиционированной МСК мыши, были выделены экзосомы со средним размером 68,1 \pm 3,8 нм (данные динамического светорассеяния), положительные по специфическим экзосомальным маркерам CD9⁺/CD63⁺ – 99,9% и TSG101⁺ – 97,8% (данные проточной цитометрии). С использованием ОТ-ПЦР было обнаружено увеличение экспрессии цитокинов TNF α , IL-1 β и IL-6 в гиппокампе мышей линии C57Bl/6 через 1,5 месяца после гамма-облучения головы в дозе 8 Гр (установка «ГУТ-200М»; кобальт-60) в сравнении с контролем. Интраназальное введение экзосом в дозе 5 мкг (по белку)/мышь в течение 4 недель, начиная через 48 часов после облучения, приводило к снижению уровней экспрессии провоспалительных цитокинов, кроме TNF α , до контрольного уровня, что свидетельствует о частичном снижении радиационно-индуцированного нейровоспаления у облученных мышей в этих условиях.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СИНТЕЗА ФУЛЛЕРЕНОЛОВ С ТЕЛЛУРОМ

И.С. Рябоконт, В.П. Седов¹, Д.Н. Орлова¹, А.А. Борисенкова^{1,2}, М.В.
Суясова^{1,3}

НИЦ Курчатовский Институт - Петербургский, nefefirina@yandex.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

² СПбГТИ(ТУ)

³ Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России

Препараты на основе радиоизотопов йода широко используются для терапии заболеваний щитовидной железы. Поскольку вследствие своих химических свойств радиоiod участвует в обменных процессах в организме, его необходимо надежно изолировать от взаимодействия со средой организма. Этого можно достигнуть, поместив радиоизотоп йода внутрь фуллереновой молекулы. Водорастворимая форма этого комплекса в виде фуллеренола подавляет биотоксичность и химическую активность йода. Важно подчеркнуть, что фуллеренолы имеют высокий процент выживаемости при облучении, что делает их перспективными «нанокапсулами» для создания йодсодержащих радиофармпрепаратов.

Целью данной работы является синтез водорастворимых фуллеренов с йодом для создания РФП и их физико-химическая характеристика.

С помощью метода, успешно апробированного при получении эндометаллофуллеренов с 3d-элементами и лантаноидами [1,2] была получена водорастворимая смесь фуллеренов с теллуrom.

После облучения протонами с энергией 1 ГэВ фуллеренола с теллуrom в гамма-спектре наблюдались изотопы I-123, I-124, после облучения нейтронами наблюдались изотопы I-131, что свидетельствует о возможности создания радиофармпрепаратов на основе водорастворимых йодосодержащих фуллеренов.

Литература.

1. Седов В.П. и др. Способ получения водорастворимых гидроксильированных производных эндометаллофуллеренов лантанидов. Патент РФ № 2659972, 2018.

2. Седов В. П. и др. Способ получения эндофуллеренов 3d-металлов. Патент РФ № 2664133 С1, 2018.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РАДИОМИКЕ ДЛЯ АНАЛИЗА КАРДИОВАСКУЛЯРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Д.С. Саматов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, denissamatov470@gmail.com

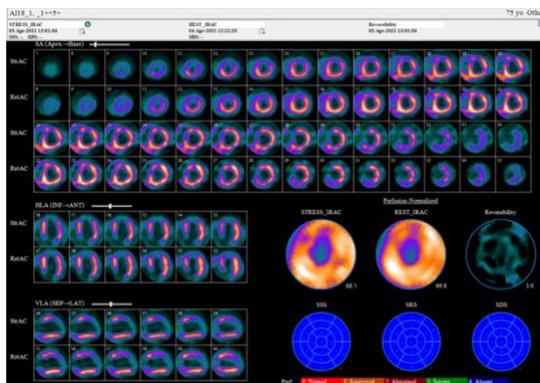
Радиомика является относительно молодой областью радиологии [1], которая ставит своей целью извлечение количественных признаков из медицинских изображений [2]. Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в широком смысле представляют собой набор вычислительных алгоритмов, которые изучают закономерности в предоставленных данных, которые позволяют делать некоторые прогнозы на их основе. Радиомика в сочетании с методами машинного обучения и искусственного интеллекта позволяет не только извлекать численные характеристики медицинских изображений, но и обрабатывать большие объемы полученных данных, которые затруднительны для анализа традиционными статистическими методами [3].

В данной работе рассмотрены примеры извлечения и первичной обработки численных характеристик планиметрических изображений, полученных методом перфузионной сцинтиграфии миокарда [4]. Сбор и первичная обработка медицинских изображений, включая их анонимизацию Рис.1(а), были проведены с использованием рабочей станции Xeleris на базе НИИ Кардиологии РАН, г. Томск. Отметим, что ежегодно данное обследование проходят около трёх тысяч человек. В связи с этим существует огромная потребность в систематизации и обработке полученной в ходе исследования информации.

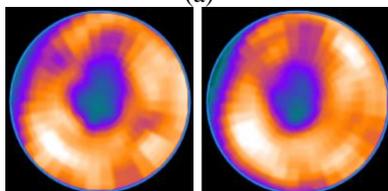
Целью данной работы является создание на основе методов машинного обучения математической модели, применимой для анализа медицинских изображений на предмет патофизиологических особенностей тканей миокарда.

При выполнении работы был подготовлен набор кардиологических изображений представленного типа Рис.1(а). На языке программирования Python был построен алгоритм первичной обработки полученного набора изображений и создан датасет изображений Рис.1(б), подготовленных для дальнейшего анализа. Также проведен первичный анализ полученных изображений и вычислены некоторые радиомические показатели, включающие

среднее значение уровня серого, максимум, минимум, дисперсию и процентилю полученных гистограмм. Также вычислены некоторые более специальные признаки, такие как асимметрия и эксцесс, которые описывают форму распределения данных по интенсивности и отражают неравномерность данных распределения относительно гауссова распределения из-за выбросов.



(a)



(б)

Рис. 1: (а) Перфузионная сцинтиграфия сердца. (б) Планиметрические изображения в покое и под нагрузкой.

Список литературы

1. B. Kocak, et.al. Radiomics with artificial intelligence: a practical guide for beginners. Affiliation: Department of Radiology Istanbul Training and Research Hospital, İstanbul, Turkey. 2019 Nov;25(6): 485–495.
2. M. E. Mayerhoefer, A. et.al. Introduction to Radiomics. Citation: Journal of Nuclear Medicine April 2020, 61(4): 488-495.
3. B. A. Varghese et.al. Texture Analysis of Imaging: What Radiologists Need to Know. Citation: American Journal of Roentgenology. 2019;212: 520-528.
3. C. Hassani, et.al. Myocardial Radiomics in Cardiac MRI. Citation: American Journal of Roentgenology. 2020;214: 536-545.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В РАДИОБИОЛОГИИ

И.А. Степалин, А.Г. Волкович, О.П. Иванов, В.Н. Потапов

НИЦ «Курчатовский Институт», iwan.stepalin@yandex.ru

В докладе изложен радиометрический метод измерения низкоактивного образца с радионуклидом Al-26. Для повышения чувствительности измерения такие образцы располагают вблизи детектора, однако в этом случае начинают проявляться эффекты суммирования каскадных и аннигиляционных γ -квантов, которые необходимо учитывать при радиометрических измерениях. Вместе с тем малая активность самого образца не позволяет проводить измерения на большем расстоянии, исключая влияние этих эффектов. Подобная ситуация может возникнуть при определении активности низкоактивных образцов In-111, Ga-67, Ta-182 и др., используемых в медицинских целях. Предложен численно-экспериментальный подход, основанный на использовании метода Монте-Карло и ряда экспериментальных данных, необходимых для оценки калибровочных коэффициентов, используемых при расчете активности образцов с Al-26 [1] с учетом указанных выше особенностей.

Во второй части доклада представлен радиометрический способ определения активности Rh-103m, находящегося в неравновесном растворе с Ru-103. Раздельное измерение их активностей осложняется почти полным совпадением их линий в области ~ 20 кэВ. Однако наличие линии 497 кэВ у Ru-103 [2] позволяет по корреляционной зависимости оценить вклад этого радионуклида в интересующую энергетическую область и выделить таким образом информацию от радионуклида Rh-103m. Таким образом становится возможным оценить раздельный вклад Ru-103 и Rh-103m в общую скорость счета в области энергии 20 кэВ.

Литература.

1. Активность радионуклидов в объемных образцах: методические рекомендации по выполнению измерений на сцинтилляционном гамма-спектрометре/ Даниленко В.Н. [и др.]. - М: ВНИИФТРИ, 1995. - 17 с.
2. D. De Frenne, Nuclear Data Sheets, Vol. 110, 2009, p. 2081-2256

РАСЧЕТ ПОГЛОЩЕННОЙ ДОЗЫ ИОНООБМЕННОЙ СМОЛОЙ ПРИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОМ ПОЛУЧЕНИИ ^{177}Lu БЕЗ НОСИТЕЛЯ

И.А. Ушаков, В.В. Зукау, Е.С. Доняева, Е.А. Шелихова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30,
jiaozi@tpu.ru

Радионуклидная терапия является эффективным методом лечения онкологических заболеваний. Снижение стоимости получения изотопов для радионуклидной терапии является приоритетным в ядерной медицине. Лютеций-177 ($T_{1/2} = 6.6443$ дн.) является β -эмиттером с максимальной энергией бета-излучения 497.8 кэВ с выходом 78.6%, гамма-излучение ^{177}Lu составляет 113 кэВ и 208 кэВ с выходом 6.7% и 11% соответственно. Теоретическое определение поглощенной дозы ионообменной смолы при хроматографическом получении ^{177}Lu , позволит определить целесообразность регенерации смолы и ее повторного использования.

Целью работы является теоретический расчет поглощенной дозы ионообменной смолы при хроматографическом получении ^{177}Lu без носителя на реакторе ИРТ-Т для ядерной медицины.

Процесс получения ^{177}Lu без носителя состоит из облучения обогащенной мишени иттербия-176 с последующим хроматографическим разделением наработанных изотопов иттербия и целевого изотопа ^{177}Lu на сильнокислотном катионите в NH_4^+ -форме при одновременном их элюировании альфа-гидроксизомасляной кислотой.

Вычисление поглощенной дозы ионообменной смолы, проводилось для фотонного и электронного излучения элюируемых со смолы радионуклидов: ^{177}Lu , ^{175}Yb и ^{169}Yb . Дополнительно рассчитывалась наработка активности ^{177}Lu , ^{175}Yb и ^{169}Yb по нейтронному спектру, содержащем 200 групп (центральный канал активной зоны реактора ИРТ-Т), составившая 100 Гбк, 20 Гбк, 8.5 Гбк соответственно. Ядерно-физическая модель состоит из ячейки, с облучаемой ионообменной смолы, выполненной в форме ионообменной колонки и источникадвигающимся от одной части ячейки до противоположной. На основании полученных результатов, целесообразно повторно использовать ионообменную смолу для нового получения ^{177}Lu после ее регенерации.

ПОЛУЧЕНИЕ РЕНИЯ-186 – ПЕРСПЕКТИВНОГО РАДИОНУКЛИДА ДЛЯ ЯДЕРНОЙ МЕДИЦИНЫ

Е.Б. Фуркина, В.А. Загрядский, Р.А. Алиев, А.Н. Моисеева, А.В.
Курочкин, Т.М. Кузнецова, Я.М. Кравец

НИЦ Курчатовский Институт, Furkina_EB@nrcki.ru

^{186}Re – перспективный радиоизотоп для применения в ядерной медицине благодаря мягкому бета-излучению и удобному периоду полураспада ($T_{1/2} = 3.72$ сут., $E_{\beta\text{max}} = 1069$ кэВ). Кроме того, мягкое гамма-излучение ($E_{\gamma} = 137$ кэВ, 9.42%) позволяет визуализировать распределение радионуклида в организме. ^{186}Re предложено применять для терапии костных метастаз, рака простаты и толстой кишки, а также в радиосиноэктомии. Интересными направлениями являются использование меченых рением липосом и других наночастиц, а также использование ^{186}Re в паре с $^{99\text{m}}\text{Tc}$.

Оптимальным способом наработки ^{186}Re является облучение обогащенного ^{186}W дейтронами. Представлена методика выделения рения из облученной вольфрамовой мишени с использованием экстракционно-хроматографического сорбента TEVA Resin (рис.1). Процесс выделения был автоматизирован. Радиохимический выход рения составил более 97%. Разработана методика регенерации мишенного материала. Суммарные потери вольфрама на всех стадиях составили не более 11%.

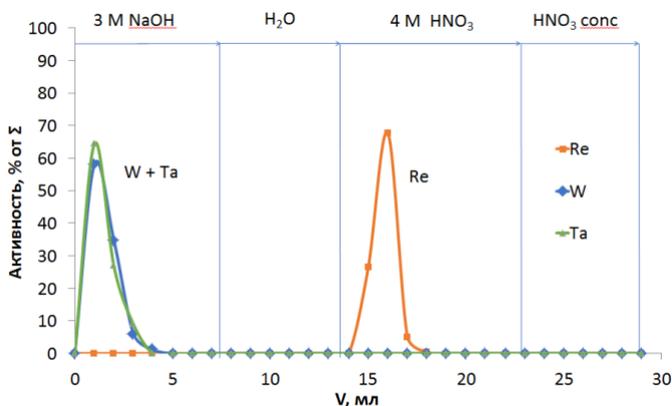


Рис.1. Элюирование вольфрама, рения и тантала в процессе автоматизированной переработки облученной вольфрамовой мишени.

ВЛИЯНИЕ ГАММА-ОБЛУЧЕНИЯ СЕМЯН НА
МОРФОФИЗИОЛОГИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПРОРОСТКОВ
LUPINUS ALBUS

Ханова А.С., Блинова Я.А., Подлущая А.В., Бондаренко В.С.,
Бондаренко Е.В.

ФГБНУ «Всероссийский научно-исследовательский институт
радиологии и агроэкологии», micenyk-anastasi@mail.ru

Индукцированный мутагенез, в частности, радиационный – один из главных инструментов для получения новых устойчивых к абиотическим и биотическим стрессорам растений в селекции зернобобовых культур [1].

Для изучения влияния γ -излучения на морфологические и физиологические параметры проростков сухие семена *L. albus* сорта Мичуринский (семена любезно предоставлены ВНИИ люпина – филиал ФГБНУ «ФНЦ кормопроизводства и агроэкологии им. В.Р. Вильямса», г. Брянск) подвергли облучению в дозах 25, 50, 100, 200 и 400 Гр с мощностью дозы 100 Гр/ч на УНУ ГУР-120 (^{60}Co , ВНИИРАЭ) в трёх повторностях по 20 семян в каждой.

Воздействие γ -излучения в дозах 200 и 400 Гр статистически значимо уменьшило длину гипокотилия и корня люпина белого, а диапазон доз от 100 до 400 Гр ингибировал массу проростков. Доза 50 Гр оказала статистически значимое стимулирующее воздействие на длину гипокотилия и корня *L. albus* по сравнению с контролем.

Анализ фотосинтетических параметров проростков люпина белого выявил, что дозы 200 и 400 Гр статистически значимо ингибировали максимальный фотохимический квантовый выход (Fv/Fm), в то время как эффективность фотохимического квантового выхода фотосистемы II (Y(II)) никак не изменилась под влиянием γ -излучения по сравнению с растениями в контрольной группе.

Оценка активности антиоксидантных ферментов показала статистически значимое увеличение активности каталазы при дозе 50 Гр, аскорбатпероксидазы при дозе 25 Гр, и гваяколовой пероксидазы при дозе 400 Гр.

Литература.

1. Н.В. Новик, С.А. Гераськин, И.А. Якуб. Радиационная биология. Радиоэкология, 2022, Т.62, №6, с. 620-628.

РАЗРАБОТКА ОТЕЧЕСТВЕННОГО РАДИОФАРМПРЕПАРАТА НА ОСНОВЕ АНАЛОГОВ СОМАТОСТАТИНА ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ НЕЙРОЭНДОКРИННЫХ ОПУХОЛЕЙ

Е.А. Шелихова, Е.С. Стасюк, Ш. Гиниятова *, Р. Балтабай*

ФГАОУ ВО НИ ТПУ, shelihova@tpu.ru

* Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева

Нейроэндокринные опухоли (НЭО) представляют собой гетерогенную группу онкологических заболеваний с разнообразной клинико-морфологической симптоматикой и биологическими особенностями. Для диагностики и лечения НЭО используют радиофармацевтические препараты на основе аналогов соматостатина, например, октреотида, меченного радионуклидами, такими как ^{111}In , $^{99\text{mTc}}$, ^{188}Re , ^{177}Lu и др.

На территории Российской Федерации зарегистрирован только один набор для приготовления РФП для диагностики и лечения нейроэндокринных новообразований – Тектротид (Национальный центр ядерных исследований Полатом, Польша). В связи с этим, представляется актуальным разработка отечественного набора для приготовления РФП для диагностики нейроэндокринной опухоли и оценки распространенности опухолевого процесса.

Нами были разработаны наборы двух составов. Первый – на основе ДРАН-модифицированного октреотида, второй – на основе HYNIC-ТОС. Радиохимическая чистота готового продукта (комплекса технеция-99м с ДРАН-октреотидом) составляет 96,2%, (комплекса технеция-99м с HYNIC-ТОС) составляет от 98% [1,2].

Доклинические исследования доказали безопасность наборов и показали, что разработанные комплексы достаточно интенсивно накапливаются в опухолях и позволяют получать сцинтиграфические изображения надлежащего качества.

Литература.

1. Larkina, M.S. et al, Development of a method for preparing octreotide derivative for diagnosis of neuroendocrine tumors/ Bulletin of Siberian Medicine-Volume 18, Issue 3, 2019, Pages 72-80.
2. Larkina, M.S. et al, Validation of an Analytical HPLC Method for a New Diagnostic Octreotide Derivative for Neuroendocrine Tumors/ Pharmaceutical Chemistry Journal- Volume 53, Issue 9, 1 December 2019, Pages 865-870/

**Секция 6.
Генетические технологии**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ УДВОЕННЫХ ГАПЛОИДОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛИНИЙ МЯГКОЙ ПШЕНИЦЫ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ КРАХМАЛА

М. Алкубеси^{1,2}, А.О. Блинков¹, М.Г. Дивашук¹, О. Оладжиде^{1,3}

1- Курчатовский геномный центр-ВНИИСБ,

*malak94kifah@gmail.com

2- ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет –
МСХА им. К.А. Тимирязева», кафедра генетики, селекции и
семеноводства

3- Московский физико-технический институт (Национальный
исследовательский университет), факультет биологической и
медицинской физики

Огромное значение на технологические свойства зерна пшеницы оказывают гены *waxy*, кодирующие фермент грануло-связанную синтетазу крахмала I (GBSSI). Гены *waxy* располагаются в каждом из 3 субгеномов пшеницы. При наличии неактивных аллелей данного гена синтез белка отсутствует или уменьшен. Манипулирование комбинациями данных аллелей способствует созданию линий пшеницы с различными свойствами зерна, пригодного для различных отраслей производства [1]. Использование технологии удвоенных гаплоидов для этих целей может играть большое значение.

В данной работе с использованием культуры пыльников были получены удвоенные гаплоиды с 4 гибридов F₂ мягкой пшеницы, созданных в результате скрещивания контрастных по генам *waxy* родительских форм. В конечном итоге из культуры пыльников удалось получить 46 жизнеспособных растений. Результаты проточной цитометрии показали, что получены гаплоидные растения, растения с обычной ploидностью, а также полиплоиды. Растения гаплоидной природы обрабатывали колхицином. Генотипирование осуществляли с использованием праймеров [1] на гены *waxy* всех трёх субгеномов. В настоящее время получены линии, различающиеся количеством неактивных аллелей и их нахождением в различных субгеномах.

Литература.

1. М.В. Климушина и др., Вавиловский журнал генетики и селекции, 16(1), с. 187-192 (2012).

LUXA GENE FROM *ENHYGROMYXA SALINA* ENCODES A FUNCTIONAL HOMODIMERIC LUCIFERASE

Р.Н. Аль Ибрахим, И.Ю. Гушин, И.В. Манухов, А.Н. Юденко

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), rahaf.alebrahim6@mail.ru

В настоящее время известно несколько клад люминесцентных бактерий. Все они содержат сходные *lux*-опероны, включающие гены *luxA* и *luxB*, кодирующие гетеродимерную люциферазу [1]. Реакция окисления альдегидов катализируется субъединицей LuxA, тогда как LuxB неактивна [2]. Недавно геномный анализ идентифицировал подмножество видов бактерий с перестроенными *lux*-оперонами, лишенными *luxB* гена [3].

Здесь мы показываем, что клетки *Escherichia coli*, трансформированная синтетическим геном *luxA* из редуцированного оперона *luxACDE* *Enhygromyxa salina*, люминесцирует при добавлении альдегидов. В целом, EsLuxA слабо светится по сравнению с люциферазами *Vibrio harveyi* (VhLuxAB) и *Photobacterium luminescens* (PlLuxAB), и наиболее активна в отношении альдегидов C4-C9. Кристаллическая структура EsLuxA, определенная при разрешении 2,71 Å, демонстрирует классическую монооксигеназную укладку, а белок преимущественно образует димер в растворе. Филогенетический анализ показывает, что EsLuxA и родственные белки могут быть бактериальными протолюциферазами, возникшими до дубликации гена *luxA* и его видообразования в *luxA* и *luxB* у ранее описанных люминесцентных бактерий. Наша работа прокладывает путь к открытию новых люцифераз, преимущество которых заключается в том, что они кодируются одним геном.

Литература.

1. E. Brodl, A. Winkler, P. Macheroux, Molecular Mechanisms of Bacterial Bioluminescence, *Comput Struct Biotechnol J.* 16 (2018) 551–564.
2. P. Dunlap, Biochemistry and genetics of bacterial bioluminescence, *Adv Biochem Eng Biotechnol.* 144 (2014) 37–64.
3. T. Vannier, P. Hingamp, F. Turrel, L. Tanet, M. Lescot, Y. Timsit, Diversity and evolution of bacterial bioluminescence genes in the global ocean, *NAR Genomics and Bioinformatics.* 2 (2020).

Работа поддержана грантом РФФ № 21-64-00018.

СТРАТЕГИЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ ШТАММА-ПРОДУЦЕНТА МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ НА КИСЛОТОУСТОЙЧИВЫХ ДРОЖЖАХ *SCHIZOSACCHAROMYCES POMBE*

Е.О. Анисимова, С.П. Синеокий, М.Г. Тарутина, А.В. Шутов

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований (ГосНИИгенетика), ekaterina.genetika@gmail.com

Молочная кислота (МК) является ценным химическим соединением, находящим широкое применение во многих отраслях промышленности, в том числе для синтеза полилактоидов - биодegradируемых полимеров.

Кислотоустойчивый штамм дрожжей *S. pombe* является перспективным кандидатом для конструирования штамма-производителя МК.

Поскольку дрожжи *S. pombe* активно синтезируют этанол, для перенаправления потока углерода к желаемому продукту необходима инактивация генов пируватдекарбоксилаз (*PDC*). В дрожжах *S. pombe* обнаружено четыре гена *PDC*, из которых по результатам RT PCR основными являются *PDC1* и *PDC2*. Получены и охарактеризованы штаммы $\Delta pdc1$ и $\Delta pdc2$ и показано, что в штамме $\Delta pdc2$ накапливается значительное количество пирувата – субстрата для синтеза МК, при этом сильно снижаются ростовые характеристики. Для оценки потенциала штаммов в их геном интегрировали ген лактатдегидрогеназы (*L-LDH*) из *Lactobacillus pentosus*, и обнаружили, что штамм $\Delta pdc1$ продуцирует МК, а штамм $\Delta pdc2$ кроме МК продолжает аккумулировать пируват, при этом рост штамма не восстанавливается.

Конструирование штамма-производителя МК было продолжено на основе штамма $\Delta pdc1$, в геном которого были дополнительно интегрированы гены гетерологичных *L-LDH* из *L. acidophilus* и *L. helveticus*. Полученный штамм продуцирует L-МК в количестве 125 г/л за 72 часа культивирования в 3 л ферментёре в аэробных условиях на среде с кукурузным экстрактом - отходом крахмалопаточного и глюкозного производства. Конверсия 56%, скорость синтеза 1.7 г/л/ч, конечный pH = 2.7.

По результатам проведенной работы получен патент РФ [1].

Литература.

1. RU 2752896 C1, дата публикации: 11.08.2021, Бюл. № 23

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГОМОЛОГИЧНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ
И СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ CRISPR/CAS9
ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ ТРАНСПОРТЕРОВ L-ВАЛИНА
У *CORYNEBACTERIUM GLUTAMICUM*

К.Э. Ануфриев, М.Е. Шереметьева, В.В. Розанцева, Д.Д. Дербииков,
Т.Е. Леонова, Т.И. Калинина, А.С. Яненко
НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических
исследований, konstantin.e.anufriev@bk.ru

L-валин – незаменимая аминокислота, широко применяемая как кормовая добавка, повышающая массу и качество мяса свиней и цыплят-бройлеров, яйценоскость кур и жирность молока. В последние годы российский рынок L-валина демонстрирует стремительный рост. Однако сейчас весь L-валин в РФ завозится из-за рубежа, а собственное производство отсутствует, что делает необходимым импортозамещение, обеспечивающее продовольственную безопасность нашей страны. Основным способом производства L-валина – биотехнологический, в основе которого лежит использование штаммов-продуцентов. Наша задача – создать собственный продуцент, для чего мы прибегаем к рациональной метаболической инженерии – совокупности методов получения штаммов с заданными свойствами путем направленного изменения метаболизма за счет редактирования генов-мишеней с известными функциями.

За основу мы взяли почвенную бактерию *Corynebacterium glutamicum*, обладающую гибким метаболизмом, стрессоустойчивостью и генетической стабильностью. Успешное изменение генома требует наличия эффективных методов модификации генов. Штаммы, представленные в исследовании, получены как традиционным методом гомологичной рекомбинации с использованием интегративной суицидной плазмиды, так и с помощью новой системы на основе CRISPR/Cas9.

Штамм *C. glutamicum* дикого типа подвергли серии модификаций, затрагивающих биосинтез L-валина, что привело к появлению у штамма продукции этой аминокислоты. Затем были созданы штаммы с усиленной валин-зависимой экспрессией экспортера L-валина *VrnFE* и инактивацией импортера *VrnQ*, благодаря чему улучшилось выведение L-валина из клеток. В результате продуктивность повысилась на 25 % и более, в зависимости от наличия в штаммах других модификаций. Данные будут использованы для создания промышленного продуцента L-валина.

Финансовая поддержка исследования: Министерство науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2019-1659).

СИСТЕМЫ РЕГУЛЯЦИИ ЧУВСТВА КВОРУМА: ИЗ МОРЕЙ В ЛАБОРАТОРИЮ

С.В. Баженов, И.В. Манухов, Е.С. Щеглова

МФТИ (НИУ), sergei.v.bazhenov@phystech.edu

Регуляторные системы чувства кворума широко распространены среди бактерий, они позволяют бактериям путем обмена специфическими низкомолекулярными соединениями осуществлять коммуникацию и координировать поведение внутри популяции. Первой обнаруженной и описанной стала LuxR/LuxI система морских бактерий *Aliivibrio fischeri*. Она включает два основных компонента: белок LuxI, продуцирующий ацильные производные гомосерина лактона (аутоиндуктор, АИ), и белок LuxR, связывающийся с АИ и активирующий транскрипцию *luxICDABEG* генов. Известны различные системы чувства кворума помимо LuxR/LuxI, при этом обмен различными видами АИ служит для внутривидовой и межвидовой коммуникации.

LuxR/LuxI системам морских бактерий были найдены применения в рекомбинантных штаммах *Escherichia coli*, в частности были сконструированы ультрачувствительные биосенсорные штаммы для поиска АИ в природных образцах (в концентрациях от 30 пМ) и АИ-продуцирующих бактерий [1]. А также разработаны экспрессионные штаммы, индуцируемые путем добавления АИ и, при наличии LuxI в клетках, способные к аутоиндукции в процессе роста [2]. Наиболее новой разработкой является экспрессионный вектор с генами *luxI-luxR2* из психрофильных бактерий *Aliivibrio logei* [3]. За счет термоллабильности закодированных белков, экспрессионный вектор позволяет осуществлять регуляцию в клетках *E. coli* одновременно в зависимости от температуры и от концентрации АИ в среде: при температуре 22 °С экспрессия индуцируется при появлении АИ в концентрации от 10 нМ, при повышении температуры до 37 °С экспрессия останавливается.

Литература.

3. S.V. Bazhenov, et al., Biosensors 2021, 11, 166.
4. S. Nocadello, E.F. Swennen, Microb. Cell Fact. 2012, 11, 3.
5. S.V. Bazhenov, et al., Appl. Microbiol. Biotechnol., 2023, 107, p. 807-818

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-1164.2022.1.4.

РОЛЬ piРНК В МЕЖВИДОВОЙ ИЗОЛЯЦИИ, ВИДООБРАЗОВАНИИ И ПОДДЕРЖАНИИ СПЕРМАТОГЕНЕЗА

С.С. Базылев, В.Е. Адашев, Л.В. Оленина, А.А. Котов

НИЦ Курчатовский Институт, bazylevser@gmail.com

Подавление мобильных элементов посредством piРНК (piwi-interacting RNAs) в герминальных тканях – один из основных консервативных механизмов поддержания стабильности генома. В связи с этим, piРНК путь – быстро эволюционирующий механизм, направленный на адаптацию организма к инвазии мобильных элементов. Подобная «гонка вооружений» может приводить к возникновению видоспецифичных кластеров piРНК в геноме, репродуктивных барьеров и прекращению потока генов между видами. Одним из таких примеров является гибридный дисгенез – эпигенетический феномен, заключающийся в стерильности потомства от скрещивания линий *Drosophila* с различающимся набором мобильных элементов [1]. Однако активность piРНК может быть направлена и против белок-кодирующих генов. Ранее нами было показано участие специфичных для *Drosophila melanogaster* piРНК, происходящих с двух геномных локусов – *AT-chX* и *Su(Ste)*, в возникновении репродуктивной изоляции посредством аномальной регуляции двух разных белковых факторов хозяина [2]. Недавно нами был обнаружен еще один локус *Petrel* в геноме *D. melanogaster*, который производит видоспецифичные piРНК к гену *pirate* и подавляет его экспрессию в семенниках [3]. Мы провели сравнительный анализ экспрессии гена *pirate* у близкородственных видов *D. melanogaster*. В результате, мы обнаружили различные профили экспрессии данного гена в гонадах, а также ряд отличий в регуляции его экспрессии. По нашим данным делеция *pirate* на фоне нарушения piРНК пути у самцов усугубляет наблюдаемый фенотип и приводит к практически полной потере фертильности. На основании полученных данных мы предположили модель, объясняющую функциональную значимость подавления *pirate* в семенниках.

Литература.

1. Riddle N., *Advances in Genetics*, 2014, pp. 105-119.
2. Kotov A.A. et al., *Nucleic Acids Res.*, 2019, 47(8):4255-4271.
3. Chen P. et al., *Genes Dev.*, 2021, 35(11-12):914-935.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-74-00029, <https://rscf.ru/project/22-74-00029/>

АНАЛИЗ ТРАНСКРИПТОМА КАК ПОДХОД К ПОИСКУ БИОМАРКЕРОВ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА, АССОЦИИРОВАННОЙ С МУТАЦИЯМИ В ГЕНЕ *GBA*

А.И. Безрукова^{1*}, К.С. Башарова¹, М.А. Николаев^{1,2}, И.В. Милюхина³,
А.К. Емельянов^{1,2}, М.М. Руденок⁴, М.И. Шадрина⁴, П.А. Сломинский⁴,
С.Н. Пчелина^{1,2}, Т.С. Усенко^{1,2}

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

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

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

⁴Институт молекулярной генетики РАН, Москва, Россия

*bz.nastya96@gmail.com

Молекулярные механизмы распространённого нейродегенеративного заболевания болезни Паркинсона (БП), ассоциированной с мутациями в гене *GBA* (*GBA*-БП), приводящие к снижению активности фермента β-глюкоцереброзидазы (*GCase*), остаются неизвестными. Цель исследования заключалась в поиске потенциальных биомаркеров *GBA*-БП путем проведения полнотранскриптомного анализа клеток черной субстанции 1-метил-4-фенил-1,2,3,6-тетрагидропиридин (МФТП)-индуцированной мышинной модели паркинсонизма и первичной культуры макрофагов периферической крови пациентов с БП с дисфункции *GCase*. В ходе анализа дифференциальной экспрессии генов с использованием пакета DESeq2 в биоинформатической среде R (vs 4.2.1) в 2 группах мышей, разделенных в зависимости от введенного препарата: раствор хлорида натрия (*NaCl*) (контроль), сочетанное введение МФТП и кондуритол-β-эпоксида (*CBE*) (МФТП+*CBE*), являющегося селективным ингибитором *GCase*, а также в первичной культуре макрофагов периферической крови пациентов с *GBA*-БП и контроле и последующего анализа обогащения функциональных групп генов, проведенного с помощью базы данных Gene Ontology, выявлено, что БП с дисфункцией *GCase* характеризуется выраженным изменением экспрессии профиля генов, вовлеченных в процессы, связанные с регуляцией аутофагии, в частности, таких как *ARL4D*, *ARL4C*, *DUSP1*, *PK4*, *SGK1*, *TRIM13*, *BCL6*, что может быть рассмотрено как потенциальные биомаркеры и мишени для разработки таргетной терапии *GBA*-БП.

ФЛОТИРУЮЩАЯ КУЛЬТУРА ПЫЛЬНИКОВ ТРИТИКАЛЕ КАК МЕТОД ИЗОЛИРОВАНИЯ МИКРОСПОР ДЛЯ ГЕНОМНОГО РЕДАКТИРОВАНИЯ

М. Алкубеси^{1,2}, А.О. Блинков^{1*}, М.Г. Дивашук¹

1- Курчатовский геномный центр-ВНИИСБ,

*aoblinkov@gmail.com

2- ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет –
МСХА им. К.А. Тимирязева», кафедра генетики, селекции и
семеноводства

В последние годы использование изолированных микроспор обретает всё большую популярность в качестве экспланта для геномного редактирования. Гаплоидные микроспоры, по сравнению с соматическими клетками и тканями, предоставляют возможность создания гомозиготных по отредактированным аллелям линий, уменьшают выход химерных и гетерозиготных растений. На сегодняшний день микроспоры редактировали с использованием электропорации [1], транспортных пептидов [2] и агробактериальной трансформации [3]. Однако, главным недостатком данной технологии является большая летальность гаплоидных клеток и низкий уровень регенерации.

В нашей работе мы остановились на флотирующей культуре, как методе изолирования микроспор. Данная технология заключается в инкубировании пыльников на питательной среде с высоким осмотическим давлением, что приводит к выходу микроспор в жидкость без дополнительных стрессов. Высокая жизнеспособность клеток является главным преимуществом. Также нами были оценены основные параметры, способствующие увеличению эффективности технологии. Было показано, что для увеличения выхода зелёных растений решающее значение играют: использование среды 190-2, отсутствие регуляторов роста, инкубирование пыльников плотность 20 шт./10 мл среды, ранняя пересадка сформированных зародышей.

Литература.

1. P. Bhowmik et al., Sci. Rep. 8, 6502 (2018).
2. A. Bilichak et al., CRISPR-Cas Methods, 2020, p. 191-202.
3. R.E. Hoffie, et al., Front. Genome Ed., 3, 784233 (2021).

ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ УВЕЛИЧИВАЕТ БИОРАСПРЕДЕЛЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ В EGFR-ПОЗИТИВНЫЕ КЛЕТКИ НА МОДЕЛЯХ *IN VITRO* И *IN VIVO*

Брезгин С.А.^{1,2}, Пономарёва Н.И.^{1,2}, Костюшев Д.С.^{1,2}, Костюшева А.П.¹, Фатхутдинова Л.И.³, Зюзин М.В.³, Покровский В.С.^{2,5,6}, Соколова Д.В.^{2,5,6}, Макаров С.В.³, Фролова А.С.^{1,2}, Чуланов В.П.^{1,4}, Пароди А.², Замятнин А.А.^{1,2}.

1 – ФГАОУ ВО Сеченовский Университет, seegez@mail.ru
2 – НТУ «Сириус»; 3 - НИУ ИТМО; 4 - ФГБУ «НМИЦ ФПИ»
Минздрава РФ; 5 – ФГБУ «НМИЦ онкологии им. Н.Н.Блохина»; 6 -
РУДН

Онкопатологии занимают второе место в структуре смертности в мире. Использование цитотоксических препаратов, упакованных в биологические наночастицы, является одним из наиболее перспективных методов химиотерапии. Для увеличения тропности к опухоли, биологические наночастицы могут быть выделены из ортотопичных клеток (т.е. клеток целевой опухоли) или функционализированы таргетирующими пептидами. В данной работе разработан подход к направленной доставке биологических наночастиц в EGFR-позитивные опухолевые клетки рака груди SKBR3 с использованием наночастиц из ортотопичных клеток либо функционализированных наночастиц. Наночастицы получали методом экструзии из клеток SKBR3 либо клеток НЕК293Т, экспрессирующих мембранный белок CD63, слитый с таргетирующим пептидом к EGFR. Характеризация наночастиц проводилась методами динамического светорассеивания и электронной микроскопии. Интернализация оценивалась с помощью проточной цитофлуориметрии, распределение меченых частиц *in vivo* изучалось с помощью IVIS. Выделенные наночастицы имели характерную морфологию и средний размер ~100 нм. Эффективность интернализации ортотопичных и функционализированных наночастиц превышала 70%. В экспериментах *in vivo* на мышцах с опухолями SKBR3, сигнал в области опухоли для меченых ортотопичных и функционализированных наночастиц составлял $39.8 \pm 13.3\%$ и $59.7 \pm 12.4\%$ от суммарного сигнала, соответственно. Для контрольных частиц, сигнал в опухоли составлял $21.6 \pm 4.7\%$ от суммарного. Таким образом, функционализированные наночастицы более эффективны для целевой доставки в опухоли, чем ортотопические. Биораспределение в опухоль *in vivo* увеличивается в 2 и 3 раза по сравнению с контролем,

соответственно. Работа выполнена при поддержке РФФ (Грант №21-75-30020).

CANDIDA PARAPSILOSIS, ВЫЗВАВШИЕ СЕПСИС У ОНКОЛОГИЧЕСКИХ БОЛЬНЫХ

Горемыкина Е.А.¹, Слукин П.В.¹, Кисличкина А.А.¹, Багирова Н.С.²,
Григорьевская З.В.², Хохлова О.Е.¹, Фурсова Н.К.¹.

Оболенск, Россия, egoremykina@inbox.ru

¹ФБУН «Государственный научный центр прикладной микробиологии
и биотехнологии», Оболенск

²ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр
онкологии им. Н. Н. Блохина», Москва

Грибы рода *Candida* вызывают инфекции у иммуносупрессированных людей. В ряде случаев заболевание может перейти в тяжелую септическую форму, приводящую к смерти пациента.

Цель: фенотипическая и молекулярно-генетическая характеристика *C. parapsilosis*, вызвавших сепсис у онкологических пациентов.

Материалы и методы. Изоляты *C. parapsilosis* (n=2) выделены в 2021 г. из крови двух пациентов онкологического отделения г. Москвы, впоследствии умерших. Гемолитическую, аспартил-протеазную и лецитиназную активности, био пленкообразование, чувствительность к антимикробным препаратам (амфотерицину В, флуконазолу, хлоргексидину и бензалкония хлориду) *C. parapsilosis* оценивали микробиологическими методами. Полногеномное секвенирование проводили на платформе Illumina MiSeq, геномы аннотировали с помощью web-сервисов RAST и BLAST.

Результаты. Изоляты *C. parapsilosis* обладали слабой гемолитической и аспартил-протеазной активностями, лецитиназная активность у них отсутствовала. Один изолят проявлял слабую способность к био пленкообразованию, а второй био пленку не образовывал. Оба изолята были чувствительны к использованному набору антимикробных препаратов. В полных геномах изолятов идентифицированы гены фосфолипазы (*plb1*) и аспартил-протеазы (*sap1*), а также гены устойчивости к тяжелым металлам (*czcd*), мышьяку (*acr3*), акрифлавину (*iff6*) и гены множественной лекарственной устойчивости (*flu1* и *mtel*). Изолят, способный формировать био пленку, нес гены био пленкообразования (*cst5*) и формирования гифов (*ect7*, *ssu1* и *vrg4*).

Вывод: *C. parapsilosis*, вызвавшие сепсис у онкологических больных, характеризуются наличием у них генетических детерминант вирулентности, биопленкообразования и множественной лекарственной устойчивости.

БИОКАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ЦЕФАЛОСПОРИНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕКОМБИНАНТНЫХ ФЕРМЕНТОВ

Н.А. Горбунов, И.А. Грошкова

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, ingagrosh@mail.ru

На основе двух рекомбинантных ферментов – гидролазы эфиров α -аминокислот (АЕН) и синтетазы цефалоспоринов-кислот (CASA) из *E. coli* получены высокостабильные биокатализаторы синтеза цефалоспоринов. Исследована специфичность АЕН в отношении структуры ацилирующего агента и показана эффективность фермента в синтезе цефаклора, цефалексина и цефадроксила. Изучен катализируемый CASA синтез цефазолина и цефамандола и разработаны эффективные методы получения этих востребованных антибиотиков [1, 2]. Синтезированы новые цефалоспорины [3], структуры которых подтверждены методом ВЭЖХ-МС. Проводится оценка их антибиотической активности.

Литература

1. Sklyarenko A.V., et al., J. Appl. Biochem. Microbiol., 2020, 56(5), p. 526-537.
2. Sklyarenko A.V., et al., J. Appl. Biochem. Microbiol., 2022, 58(3), p. 251-260.
3. Скляренко А.В., и др., Биотехнология, 2022, 38(2), с. 43-56.

НАЦЕЛИВАНИЕ ГЕНОВ ДОМАШНЕГО ХОЗЯЙСТВА С ПОМОЩЬЮ БИОМАРКЕР-АКТИВИРУЕМЫХ АГЕНТОВ В ГЕННОЙ ТЕРАПИИ РАКА

В.С. Дрозд, А.А.Салимова, Д.С. Рыбалко, Д.М.Колпащиков*

Химико-биологический кластер, drozd@scamt-itmo.ru

* Национальный исследовательский университет "ИТМО"

Антисмысловые олигонуклеотиды (АСО) имеют простой дизайн в виде одной терапевтической цепи ДНК, что дает до 98 % эффективности нокдауна целевых генов. Однако, лекарственные препараты на основе АСО до сих пор не преодолели барьеры 2 и 3 фаз клинических исследований в онкотерапии. Мы связываем это с неэффективным выбором генов-мишеней, которые сверхэкспрессированы, ассоциированы с заболеванием, для их подавления требуются огромные ресурсы и высокая лекарственная нагрузка на пациента. Второе ограничение технологии - невозможность нацеливания других генов, не связанных с заболеванием, но несущих жизненно важные функции для клеток. Подавление функции таких генов домашнего хозяйства (ГДХ) могло бы в разы усилить эффективность запуска апоптоза, однако такая стратегия опасна возникновением очагов цитотоксичности как в нормальных, так и в раковых тканях, если использовать АСО в классическом виде.

Чтобы открыть новую дверь в эффективной генной терапии рака, мы разрабатываем свой оригинальный подход по нацеливанию ГДХ только в раковых клетках, наделяя АСО дополнительным функционалом. В основе терапевтического модуля разрабатываемых биомаркер-активируемых агентов лежит принцип АСО, однако терапия запускается в ответ на взаимодействие сенсорного модуля агента с онкомаркером. Каждый агент проходит 4 стадии валидации: от фундаментальной проработки дизайна, до подтверждения гипотезы в растворе, рационального внедрения химических модификаций и тестирования в раковых клеточных линиях.

Предварительные дизайны показывают положительную динамику активации условного нокдауна модельного гена GFP как в условиях близких физиологическим, так и в клеточной линии миелоидного лейкоза К-562. Далее агенты будут перепрограммированы на подавление ГДХ, снижение функции которого вызовет высокую цитотоксичность раковых клеток.

YTHDF3 – МАСТЕР-РЕГУЛЯТОР ПРОТИВОВИРУСНОГО ОТВЕТА ПРИ ИНФЕКЦИИ ВИРУСОМ ГЕПАТИТА D

А.Ю. Егоршина¹, А.П. Костюшева¹, С.А. Брезгин^{1,2}, Н.И. Пономарева^{1,2}, А.С. Фролова^{1,2}, А.А. Замятнин^{1,2}, А.Н. Лукашев¹, А.В. Иванов³, Н.Ф. Закирова³, В.П. Чуланов¹, Д.С. Костюшев^{1,2}

¹ ФГАОУ ВО Сеченовский Университет

² Научно-технологический университет «Сириус»

³ Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН

Социальная значимость заболеваний, вызываемых вирусами гепатита В (ВГВ) и D (ВГD), остается высокой среди всех возрастных групп населения. На сегодняшний день полная элиминация вирусов гепатита В и D при хронической форме инфекции невозможна. Поиск потенциальных мишеней для терапии инфекций ВГВ/ВГD необходим для создания новых, эффективных методов противовирусной терапии. В рамках данной работы был проведен скрининговый поиск факторов, подавляющих репликацию ВГВ и ВГD с помощью систем CRISPR-активации транскрипции. Было проанализировано противовирусное действие более 157 факторов, 96 из которых снижали количество РНК гепатита В и D более чем на 50%. Наиболее эффективным из них был YTHDF3, активация которого приводила к снижению количества РНК гепатита В и D на >90%, а также к дестабилизации вирусных РНК. Кроме того, активация YTHDF3 стимулировала экспорт мРНК противовирусных факторов из ядра в цитоплазму с последующей стабилизацией данных мРНК в цитоплазме. Так, YTHDF3 может регулировать противовирусный ответ при инфекции вирусом гепатита D. Дальнейшее изучение механизмов действия YTHDF3 на уровне транскриптома, эпитранскриптома, протеома и метаболома позволит определить совокупное влияние гиперэкспрессии YTHDF3 на репликацию вирусов гепатита В и D.

Исследование поддержано грантом РФФ №22-75-10032

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ БИОКАМУФЛИРОВАНИЯ АДЕНО-АССОЦИИРОВАННЫХ ВЕКТОРОВ

Качанов А.В.¹, Пономарева Н.И.^{1,2}, Брезгин С.А.^{1,2}, Костюшева А.П.¹, Гордейчук И.В.³, Баюрова Е.О.³, Замятнин А.А.^{1,2}, Демина П.А.⁴, Хайдуков Е.В.⁴, Малоголовкин А.С.^{1,2}, Лукашев А.Н.¹, Чуланов В.П.¹, Костюшев Д.С.^{1,2}

¹ ФГАОУ ВО Сеченовский Университет, kachanov.av99@gmail.com

² Научно-технологический университет «Сириус»

³ ФГАНУ «ФНЦиРИП им. М. П. Чумакова РАН»

⁴ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника.»

Адено-ассоциированные векторы (AAV) широко используются для *in vivo* заместительной терапии наследственных заболеваний. Несмотря на ряд одобренных для клинического использования препаратов, AAV обладают рядом недостатков, в том числе высокой иммуногенностью, с которой связано возникновение тяжелых побочных реакций, а также случаи гибели пациентов. В данной работе предложен метод защиты AAV от действия нейтрализующих антител с сохранением тропности за счет камуфлирования AAV биологическими мембранами.

В результате, получены AAV, камуфлированные мембранами мезенхимных стромальных клеток (МСК) с эффективностью камуфлирования в ~25%. Получены криоТЭМ изображения камуфлированных AAV, продемонстрирована эффективная доставка AAV с репортерным EGFP конструктом с эффективностью интернализации > 90%. Выявлено увеличение интенсивности флуоресцентного сигнала при использовании биокамуфляжа, в том числе при использовании нейтрализующей сыворотки.

Вывод: биокамуфлирование AAV является перспективным методом повышения эффективности доставки генетического материала в клетки человека и снижения необходимых доз для достижения терапевтического эффекта.

ПОЛУЧЕНИЕ ГЕННОМОДИФИЦИРОВАННЫХ ЛИНИЙ
КРЫСИНЫХ КАРДИОМИОБЛАСТОВ H9c2, НЕСУЩИХ
МУТАЦИИ, АССОЦИИРОВАННЫЕ С РАЗВИТИЕМ
ГИПЕРТРОФИЧЕСКОЙ КАРДИОМИОПАТИИ У ЧЕЛОВЕКА

А.Л. Класс¹, Е.В. Филатова¹, Д.И. Смирнова², С.И. Шрам¹, М.И.
Шадрин¹, П.А. Сломинский¹

¹НИЦ Курчатовский Институт - ИМГ, annaclass@img.msk.ru

²Российский химико-технологический университет им. Д.И.
Менделеева

Среди генетически обусловленных патологий миокарда наиболее распространенной является гипертрофическая кардиомиопатия (ГКМП). К сожалению, на данный момент точный механизм патогенеза ГКМП малоизучен и, как следствие, отсутствуют этиоспецифичные методы лечения [1]. Одним из наиболее актуальных подходов для изучения подобных патологий считается получение клеточных моделей, несущих конкретные мутации и позволяющих отследить функциональные нарушения на самом раннем этапе [2]. В связи с этим, целью нашей работы является получение клеточных линий, несущих ГКМП-ассоциированные мутации.

Задача данной работы заключалась в создании конкретной линии клеток, несущей мутацию p.G741R (c.2221G>A) в гене тяжелой цепи миозина (*MYH7*). Редактирование генома крысиных кардиомиобластов H9c2 осуществлялось с использованием системы CRISPR/Cas9 путем внесения RNP-комплексов с гРНК и донорной оцДНК, несущей искомую замену, методом липотрансфекции. Согласно результатам секвенирования (NGS) эффективность редактирования и получения целевой замены составила 8%, что является хорошим показателем и демонстрирует адекватность данного метода для используемой клеточной линии.

Литература.

1. Mosqueira, D., Smith, J. G., Bhagwan, J. R., & Denning, C. (2019). Modeling hypertrophic cardiomyopathy: mechanistic insights and pharmacological intervention. *Trends in molecular medicine*, 25(9), 775-790.
2. Hoes, Martijn F., Nils Bomer, and Peter Meer. "Concise review: the current state of human in vitro cardiac disease modeling: a focus on

gene editing and tissue engineering." *Stem cells translational medicine* 8.1 (2019): 66-74.

СУПЕР-ЭКСПРЕССИЯ ГЕНОВ ЗЕЛЁНОГО И КРАСНОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ В *RHODOCOCCUS QINGSHENGII*

Кожаева О.В., Гречишникова Е.Г., Лавров К.В., Шемякина А.О., Яненко А.С.

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, kozhaeva.oxanaw@gmail.com

Изучены эффекты супер-экспрессии генов флуоресцентных белков turboGFP и turboRFP (далее - GFP, RFP) в штамме *R. qingshengii* TA37 (далее – TA37), биокатализаторе для получения акриловых мономеров [1, 2]. Задачами работы были оценка (1) уровней светимости клеток, (2) влияния синтеза больших количеств белков на скорость роста культуры, (3) скорости «созревания» активных форм белков в клетках. Для супер-экспрессии использовали сверх-сильные промоторы P_{tuf}, и P_{T5}, и P_{nh}, в составе плазмид с кассетами P_{tuf}-GFP и P_{T5}-RFP, и кассетой сравнения P_{nh}-aat (ген ациламидазы). Плазмидные штаммы культивировали в жидкой среде, и измеряли оптическую плотность культуры, удельную флуоресценцию клеток (на спектрофотометре), и содержание GFP и RFP на ДС-Na-ПААГ электрофорезе.

Флуоресценции клеток с GFP и RFP составляли 1000-3000 ед., при уровнях флуоресценции контрольных клеток ок. 1-2 ед., при содержании этих белков не менее 20% от растворимых клеточных белков. Синтез всех трёх белков снижал скорость накопления биомассы примерно на 30%, по сравнению со штаммом с плазмидой без генов. Синтез GFP не снижал, а RFP несущественно снижал скорость роста культуры, по сравнению с синтезом ациламидазы. Созревание активных форм GFP и RFP практически не отставало от роста культуры (по результатам измерения прибавки флуоресценции при инкубации клеток в течение суток при +4°C).

Таким образом, продукты исследованных генов не токсичны, эффективно синтезируются, и могут быть использованы в качестве репортёрных генов в *R. qingshengii* для разработки промышленных биокатализаторов.

Работа выполнялась в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» (номер АААА-А20-120093090015-2 от 30.09.2020).

Литература.

1. К.В. Лавров и др. Биотехнология, 2012, № 4, С. 26-30

2. Lavrov K.V. et al. Microbiology Resource Announcements, 2021, Vol. 10, No. 50.

РАЗРАБОТКА ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ СИНТЕЗА БЕЛКОВ В ФОРМЕ АКТИВНЫХ ТЕЛЕЦ ВКЛЮЧЕНИЯ В КЛЕТКАХ *E. COLI*

А.С. Комолов^{*1}, Е.П. Санникова¹, И.И. Губайдулин¹, К.С. Плохих²,
Н.В. Булушова¹, Д.Г. Козлов¹

¹НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, askomolov@mail.ru

²НИЦ «Курчатовский институт»

Разработана новая платформа для получения биологически активных белков и пептидов (белков-мишеней) в клетках *E. coli*. Платформа включает N-концевой самоассоциирующий пептид L₆KD, слитый с белком SUMO (Smt3) дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*, известным своей шаперонной активностью. Платформа стимулирует синтез корректно свернутых белков-мишеней в составе фьюжнов, собирающихся в клетках *E. coli* в активные тельца включения (АТВ).

Эффективное применение данной платформы продемонстрировано на белках, различающихся размером (от 2,5 до 36 кДа), четвертичной структурой, эффективностью свертки и наличием дисульфидных связей. Было показано, что в составе АТВ белок SUMO сохраняет шаперонную активность, способствуя корректной свертке белков-мишеней, а также обеспечивает возможность их высвобождения из состава АТВ под действием Upr1 протеазы.

С помощью корреляционной световой и электронной микроскопии (CLEM) показано, что целевые фьюжны, синтезируемые в клетках *E. coli* на платформе L₆KD-SUMO, формируют спутанные в комки фибриллярные структуры.

Новая платформы L₆KD-SUMO способна обеспечивать синтез сложных ферментных комплексов, а также позволяет значительно упростить способ получения целевых молекул из состава АТВ без применения ренатурации.

М6А-МЕТИЛИРОВАНИЕ ВИРУСОВ ГЕПАТИТА В И Д И ЕГО РОЛЬ В ПАТОГЕНЕЗЕ ХРОНИЧЕСКИХ ВИРУСНЫХ ГЕПАТИТОВ

А.П. Костюшева¹, С.А. Брезгин^{1,2}, Н.И. Пономарева^{1,2}, Е.Д. Семенченко¹, О. Багорова³, И.В. Гордейчук³, А.Н. Лукашев¹, В.П. Чуланов¹, Д.С. Костюшев^{1,2}.

¹ ФГАОУ ВО Сеченовский Университет, kostyusheva_ar@mail.ru

² Научно-технологический университет «Сириус»

³ ФГАНУ «ФНЦИРИП им. М. П. Чумакова РАН

М6А модификации РНК играют роль в процессах репликации вирусных инфекций, регуляции иммунного ответа, опухолевой трансформации, патогенезе заболеваний инфекционной природы. Хронический гепатит В (ХГВ) и D (ХГД) – тяжелые заболевания печени, связанное с ко-инфицированием вирусами гепатита В и D (ВГВ и ВГД). Известно, что ВГВ и ВГД могут м6А-модифицироваться по нескольким сайтам, однако в целом м6А модификации данных вирусов и клеточных РНК при ХГВ/ХГД практически не изучены. М6А-модификация прегеномной РНК ВГВ влияет на обратную транскрипцию и снижает стабильность РНК. Вместе с этим, возможность м6А метилирования ВГД фактически не изучена. М6А модификации вирусных РНК могут иметь прогностическое значение для выбора оптимальных методов и режимов терапии; их использование может позволить предсказывать скорость прогрессии заболевания и наступления исходов ХГВ и ХГД (цирроз и рак печени). В данной работе была проведена оценка влияния внесения целевых м6А-меток в геномах ВГВ и ВГД на жизненный цикл вирусов, а также оценка транскриптома и м6А-эпитранскриптома клеточных и вирусных РНК в патогенезе ХГВ и ХГД. Транскриптом и м6А-эпитранскриптом анализировали в биопсийном материале пациентов с ХГВ и ХГД. Результаты биоинформатического анализа, влияние м6А модификаций на репликацию ВГВ и ВГД валидировали *in vitro* в экспериментах с искусственным внесением м6А-модификаций в РНК с помощью системы dCas13-Mettl. В результате выявлены сотни дифференциально представленных транскриптов и м6А меток, идентифицированы новые сайты м6А в вирусных РНК, изучено их влияние на дестабилизацию вирусных РНК и подавление вирусной репликации. Работа поддержана грантом РФФ 22-75-10032.

ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ ЭНДОЛИЗИНА ДЛЯ ГИДРОЛИЗА ПЕПТИДОГЛИКАНА КЛЕТОЧНОЙ СТЕНКИ *STAPHYLOCOCCUS AUREUS*

А.М. Красникова, Е.П. Санникова

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, aalinek@icloud.com

Современные бактериальные инфекции сделали источником серьезных проблем для здравоохранения всего мира. Ситуацию осложняет стремительно развивающаяся устойчивость бактерий к антибиотикам. Одним из возможных решений является использование литических ферментов бактериофагов (эндолизина), вызывающих гибель патогенных бактерий в результате высокоспецифичного гидролиза химических связи в пептидогликанах их клеточных стенок.

Целью работы являлась оптимизация структуры литического СНАР-домена эндолизина фага К *Staphylococcus aureus* [1] с целью повышения его эффективности.

Для модификации использовали 5 вариантов катионных пептидов [2,3], присоединенных к N-концевой последовательности СНАР-домена эндолизина через линкерный участок -GSG4S-. Для биосинтеза целевых белков получали генетические конструкции, которыми трансформировали штамм *E. coli* BL21(DE3). Для очистки целевых белков разработали универсальную методику, включающую комбинацию анионо- и катионообменной хроматографии. В результате для оценки активности были получены 5 целевых (M2-M8) и 1 контрольный (К) препараты чистотой свыше 95%.

Исследование литической активности показало, что как минимум один из модифицированных белков (M6), обладавший 2-кратно повышенной активностью (табл.), представлял интерес для дальнейшего изучения.

Таблица 1. Результаты измерения литической активности

Препарат	К	M2	M4	M5	M6	M8
Активность, %	100	28,3	63,2	109,4	201,3	58,3

Литература.

1. Патент РФ RU 2 715 694 C1, 2019.
2. H. Shin et al. *Biomaterials* 24, 2003, p. 4353–4364.
3. Suh-Chin Wu, et al., Wiley InterScience, 2006, p. 557-564.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ЭСТЕРАЗЫ NCG10717 НА
ПЕНООБРАЗОВАНИЕ ПРИ ФЕРМЕНТАЦИИ
ШТАММА-ПРОДУЦЕНТА ВАЛИНА *CORYNEBACTERIUM*
GLUTAMICUM

Т.Е. Крокунова, М. Е. Шереметьева, Т.Е. Шустикова *

Московский Политехнический университет, факультет Химической
технологии и Биотехнологии

* НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс
генетических исследований, igenetic@yandex.ru

Corynebacterium glutamicum – один из наиболее важных микроорганизмов в биотехнологии, в настоящее время используемый для производства нескольких миллионов тонн аминокислот в год [1]. Одной из проблем культивирования *C. glutamicum* является активное пенообразование. Некоторые белки и продукты распада жиров является основным фактором пенообразования [2,3]. Описаны ферменты *C. glutamicum*, эстеразы NCg10336, NCg10717 и NCg12912, связанные с пенообразованием [4].

Была предсказана пространственная структура эстеразы NCg10717, сконструирована и наработана интегративная плазида, содержащая делетированный ген данной эстеразы и получен штамм *C. glutamicum* с делецией гена эстеразы NCg10717, сохранивший уровень продукции валина и нуждавшийся в меньшем количестве пеногасителя при ферментации в аэробных биореакторах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Грант № 075-15-2019-1659).

Литература.

1. Henke N. A. et al., Genes., 2018. p. 219.
2. Бирюков В. В. и др. Основы промышленной биотехнологии //М.: КолосС. 2004. С. 296.
3. Linke D. et al., Journal of the American Oil Chemists' Society. 2009. p. 437-444.
4. Lee P. et al. Microorganism having improved L-lysine productivity and method for producing L-lysine using same: пат. 10208325 США. 2019.

ПОЛУЧЕНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАДИАЦИОННОГО МУТАГЕНЕЗА НА БЫСТРЫХ НЕЙТРОНАХ ИСХОДНЫХ ФОРМ ДЛЯ СИНТЕТИЧЕСКОЙ СЕЛЕКЦИИ КУЛЬТУР РИСА

А.И. Кругляк¹, Ю.В. Алексеенок¹, Н.О. Аппазов², К.Б Бакирулы³, А.С. Дорожкевич¹

¹Объединенный институт ядерных исследований,
Anastasiya.Kruglyak@nf.jinr.ru

²Кызылординский университет имени Коркыт Ата, Казахстан

³Казахский НИИ рисоводства им. Жахаева, Кызылорда, Казахстан

Рис (*Oryza sativa* L.) является важным продуктом питания для большей половины мирового населения [1], а также универсальным модельным объектом для злаковых культур, ввиду простоты своего генома [2].

В последние годы ученые различных стран мира для создания новых культур риса все чаще используют метод индуцированного мутагенеза [3]. Использование нейтронов в качестве мутагена приводит к увеличению разнообразия мутантных форм и позволяет комплексно решить проблемы засухи и засоления почв.

В результате облучения семян риса быстрыми нейтронами с энергией до 4.1 МэВ (ЭГ-5, ОИЯИ, Дубна, Россия) установлены соответствующие средние летальные дозы (LD50). Выявлено сортовое различие влияния действия быстрых нейтронов на количество индуцированных резистентных мутантных форм.

Показано, что наибольшее количество мутантных форм способен продуцировать сорт Сыр Сулуы (Казахский НИИ Рисоводства, Кызылорда). Большинство растений этого сорта отличаются низкорослостью и карликовостью (<80 см), короткостью и высокой пустозерностью метелок, что указывает на то, что они являются мутантными формами, проявляющими устойчивость к стрессовым факторам (NaCl, сорбит). Эти растения будут использованы в качестве исходных форм в синтетической селекции при создании сортов с необходимыми свойствами.

Литература.

1. R. Mehrotra, et al., J. Plant Physiol., 2014, p. 486–96.
2. V.E. Viana, et al. Mutagenesis in Rice: The Basis for Breeding a New Super Plant // Frontiers in Plant Science, 2019.
3. S. Yanjing, et al., Asian-Australas J. Anim. Sci., 2012, p. 800-805.

ДРОЖЖИ *OGATAEA HAGLERORUM* – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ ХОЗЯИН ДЛЯ ПРОДУКЦИИ КОРМОВЫХ ФЕРМЕНТОВ β -МАННАНАЗЫ И ФИТАЗЫ

А.Р. Лаптева, М.Д. Каширская*, С.П. Синеокий, М.Г. Тарутина,
А.С. Федоров

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических
исследований, anastasya.lapteva21@yandex.ru
* АО «Биоамид», Саратов, Россия

Метилотрофные дрожжи - наиболее технологичные организмы, используемые для производства рекомбинантных белков.

Наиболее часто для экспрессии рекомбинантного белка применяют метилотрофные дрожжи *Pichia pastoris* (ныне *Komagataella phaffii*), которые способны секретировать до 20 мг/мл белка при температуре 30°C. Права на экспрессионную систему *P. pastoris* принадлежат компании Phillips Petroleum. Данная система экспрессии доступна научному сообществу для исследовательских целей, однако их использование для коммерческих целей ограничено политикой распространения материалов. Поиск и разработка альтернативных вариантов экспрессионных систем метилотрофных дрожжей является актуальной задачей.

Наряду с дрожжами *K. phaffii* особое внимание ученых привлекают термотолерантные метилотрофные дрожжи рода *Ogataea* (ранее *Hansenula*), способные расти при температуре до 50 °С. Нами были развиты основные генно-инженерные подходы для работы с новым видом дрожжей *O. haglerorum* и получены высокопродуктивные штаммы-продуценты ферментов β -маннаказы и фитазы.

Штаммы-продуценты β -маннаказы и фитазы при культивировании в ферментере при 37°C секретируют 4,25 г/мл белка и 23,7 мг/мл белка соответственно, при этом активность ферментов составляет 51066 ед./мл и 17660 ед./мл [1,2].

Поскольку система *O. haglerorum* зарекомендовала себя как конкурентоспособная в сравнении с *K. phaffii*, интерес к ее использованию стимулирует исследования, нацеленные на оптимизацию этой системы.

Литература

1. Патент РФ 2747782, дата публикации 14.05.2021 Бюл. №14

2. Патент РФ2785901 С1, дата публикации 14.12.2022 Бюл. №35

ИЗМЕНЕНИЕ ТРАНСКРИПЦИИ, ИНДУЦИРОВАННОЕ ПОВЫШЕНИЕМ АКТИВНОСТИ GSK3 НА ЭМБРИОНАЛЬНОЙ СТАДИИ, ВЛИЯЕТ НА ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОСТЬ ЖИЗНИ

Д.Р. Малышев, М.В. Тростников

НИЦ «Курчатowskiй Институт», Лаборатория геномной изменчивости
malyshev.dmitry95@gmail.com

GSK3 – консервативная серин-треониновая протеинкиназа, которая участвует в большинстве связанных с поддержанием гомеостаза метаболических путей и является на данный момент объектом пристального внимания в биологии старения, а также связанных со старением патологий различного характера, в частности, нервной системы [1]

Нами было показано, что сверхэкспрессия в эмбриональном периоде транскриптов *RO* и *RB* гена *shaggy*, кодирующего GSK3 *D. melanogaster*, влияет на продолжительность жизни (ПЖ) и профиль экспрессии генов. В работе были использованы экспериментальные мухи двух генотипов: в первом случае трансгенная конструкция, кодирующая транскрипт *RO*, экспрессировалась во всем эмбрионе, а во втором случае трансгенная конструкция, кодирующая транскрипт *RB*, экспрессировалась только в нервной системе эмбриона. Сверхэкспрессия GSK3 во всем эмбрионе приводила к увеличению ПЖ у самцов и снижению у самок, тогда как сверхэкспрессия только в нервной системе приводила к снижению ПЖ у обоих полов. Был проведен анализ уровня транскрипции мишеней GSK3 у экспериментальных и контрольных особей, что позволило обнаружить специфические изменения экспрессии генов, которые могут объяснять изменение ПЖ у взрослых мух.

Полученные результаты могут указывать на существование механизма регуляции ПЖ, который связан с влиянием эмбриональной экспрессии GSK3 на транскрипцию генов, а также со специфической активностью GSK3 в нервной системе эмбрионов.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-74-00065
НИЦ «Курчатowskiй институт»

Литература.

1. Souder D. C., Anderson R. M. An expanding GSK3 network: implications for aging research //Geroscience. – 2019. – T. 41. – №. 4. – С. 369-382.

ВНЕХРОМОСОМНАЯ ЖИЗНЬ РЕТРОТРАНСПОЗОНОВ РАСТЕНИЙ

П.Ю. Меркулов, Е. Г. Егорова, И.В. Киров

ФГБНУ Всероссийский научно-исследовательский институт
сельскохозяйственной биотехнологии, paulmerkulov97@gmail.com

Мобильные элементы (транспозоны) являются неотъемлемой частью геномов эукариот. У растений данные элементы могут занимать обширное пространство в геноме, выполняя структурную функцию, однако их транспозиционная активность всё чаще рассматривается в качестве источника адаптационной и эволюционной изменчивости [1]. Ретротранспозоны, преобладающий класс мобильных элементов у растений, осуществляют свою пролиферацию путём многостадийного жизненного цикла. Ввиду мутагенного потенциала экспрессия значительной части активных ретротранспозонов подавляется системой многоуровневого сайленсинга, которая может быть релаксирована в пределах конкретной ткани или на определённых стадиях развития растений. Таким образом формируемый ретротранспозонами активный мобилом растений характеризуется множеством уровней и динамичностью своего проявления, что обуславливает необходимость анализа каждого этапа их жизненного цикла.

В нашем исследовании при помощи секвенирования технологией Illumina продуктов SIRT [2], а также использования Mobilome-seq [3] с применением нанопорового секвенирования был проанализирован *ddm1* мутант *A. thaliana* как в нестрессовых условиях, так и в условиях теплового стресса. Известно, что данная мутация опосредует гипометилирование ДНК, и, соответственно, реактивацию некоторых мобильных элементов. Анализ полученных нами данных позволил охарактеризовать экспрессию отдельных копий различных семейств ретротранспозонов, активных в *ddm1*, а также изучить изменение их активности под влиянием теплового стресса.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-74-10055.

Литература.

1. L. Galindo-González et al., *Gene.*, 2017., Vol. 626. p. 14-25.
2. J. Griffiths et al., *Molecular Plant.*, 2017., Vol. 11., №3.
3. S. Lanciano et al., *PLoS Genet.*, 2017., Vol. 13., № 2., e1006630.

РЕДАКТИРОВАНИЕ ГЕНОМА МЯГКОЙ ПШЕНИЦЫ: ВСЕСТОРНЫЙ ОБЗОР ПРОБЛЕМЫ, ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Б.Б.Наджодов

Российский государственный аграрный университет- Мсха
им. К.А. Тимирязева, e mail: boburnajodov@gmail.com

Аннотация Редактирование генома как CRISPR-Cas9 — это мощный инструмент для внесения точных изменений в ДНК живых организмов. Мягкая пшеница (*Triticum aestivum* L.) является одной из наиболее важных зерновых культур во всем мире, и были предприняты значительные усилия для повышения ее урожайности, качества и устойчивости к биотическим и абиотическим стрессам. Одним из подходов, используемых для достижения этих целей, является генетическая модификация, которая включает в себя манипуляции с ДНК растений. Одной из основных проблем является сложность генома пшеницы, который является большим содержащим нуклеотидов и три набора хромосом (AABBDD), гексаплоидная пшеницы который выращивается во всем мире. Сложность генома затрудняет нам определение и нацеливание конкретных генов для редактирования генома. Несмотря на эти проблемы, редактирование генов в пшенице открывает большие перспективы для повышения продуктивности и устойчивости сельскохозяйственных культур и может способствовать обеспечению продовольственной безопасности в условиях глобальных проблем, таких как изменение климата и рост числа населения.

В последние годы достижения в области генной инженерии позволили исследователям более точно и эффективно редактировать геном мягкой пшеницы, открывая новые возможности для улучшения урожая. В данном обзоре представлены технические аспекты редактирования генома CRISPR-Cas9 в пшенице, включая дизайн направляющих РНК, методы доставки и стратегии отбора. Мы также обсудим потенциальное применение этой технологии в селекции пшеницы, а также нормативные и этические вопросы, связанные с ее использованием.

Список литературы

1. Стрыгина К.В., Хлесткина Е.К. Редактирование генов пшеницы, ячменя и кукурузы с использованием системы CRISPR/Cas. Биотех и селекция растений;3(1):46-56. (2020)
2. Kumar, R., et.al. CRISPR-based genome editing in wheat: a comprehensive review and future prospects. *Mol Biol Rep* 46, p.3557–3569 (2019)
3. Kuluev, B.R., et.al. Delivery of CRISPR/Cas Components into Higher Plant Cells for Genome Editing. *Russ J Plant Physiol* pp.694–706 (2019)

НАБОР *LUX*-БИОСЕНСОРОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕНОТОКСИЧНОСТИ НОВОСИНТЕЗИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

С.В. Баженов, И.В. Манухов, У.С. Новоятлова

МФТИ (НИУ), novoyatlova.us@phystech.edu

Lux-биосенсоры — это бактериальные клетки, содержащие два основных генетических элемента: стресс-индуцируемый промотор и гены люциферазы под его контролем. Область применения *lux*-биосенсоров широка: фармацевтика, токсикология, пищевая промышленность и экологические исследования [1]. Набор биосенсоров с различными специфичными стресс-индуцируемыми промоторами позволяет по повышению люминесценции конкретных штаммов различать конкретные типы токсического воздействия. Расширение набора биосенсоров за счет использования как грамотрицательных бактерий *E. coli*, так и грамположительных бактерий *B. subtilis* [2] позволяет проводить более разносторонние и полные исследования. При конструировании биосенсоров используются как аналогичные в *E. coli* и *B. subtilis* регуляторные элементы, так и уникальные для каждой из бактерий.

Разработанный набор *lux*-биосенсоров был успешно применен для генотоксикологических исследований ряда новосинтезированных соединений, перспективных для медицинского [3] и технического применения [2,4]. Было показано отсутствие генотоксичности ряда ингибиторов эпоксигидролаз в отношении бактериальных клеток [3]. Было показано, что незначительное изменение структуры напряженного углеводорода может изменить механизм его токсичности [2,4]. При этом в зависимости от исследуемого вещества большую чувствительность проявляли то биосенсоры на основе *B. subtilis*, то на основе *E. coli*, а разница пороговых концентраций в проведенных исследованиях для одного вещества достигала 1 порядка. Литература.

1. S.V. Bazhenov, et al., Bios.Bioel.X, 2023, 100323.
2. A.G. Kessenikh, et al., Int. J. Mol. Sci., 2021,22(17), 9571.
3. V.V. Burmistrov, et.al., Int. J. Mol. Sci.2022,23(18).
4. U.S. Novoyatlova, et.al., Biosensors 2023,13(1), 57.

Работа поддержана грантом РФФ 22-74-10047.

ВОЗМОЖНОСТИ ИЗУЧЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ГЕНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ПРЕДРАСПОЛОЖЕННОСТИ К АЛКОГОЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЧЕЛОВЕКА У МАКАК-РЕЗУС

Л.Е. Павлова, М.Ф. Тимина, А.В. Панченко, А.А. Агумава

ФГБНУ «НИИ медицинской приматологии», pavlova_laura@mail.ru

Злоупотребление алкоголем и алкогольная зависимость являются мультифакториальными и полигенными заболеваниями. В работе проведено генотипирование и изучение ассоциаций полиморфизма ряда генов нейромедиаторной системы с уровнем потребления алкоголя макаками-резус при свободном выборе между водой и 4% раствором этанола. Целью данной работы было изучение влияния полиморфизма генов системы нейромедиаторов как факторов, определяющих алкогольную мотивацию.

Объектом исследования служили 35 клинически здоровых половозрелых самцов *Macaca mulatta* возрастом 8–16 лет. У животных определяли наличие аллелей: полиморфизма гена μ -опиоидного рецептора (oprml Arg26Pro, SNP 77 C>G); полиморфизм гена нейрпептида Y (npy SNP –1002 T>G); VNTR полиморфизм гена моноаминоксидазы (maoa VNTR 5, 6, 7 - 18 п.н. повторы); полиморфизм в промоторе гена кортиколиберина (crh SNP –248 C>T) и полиморфизм гена транспортера серотонина (5-htt Indel-полиморфизм). При помощи аллель-специфической ПЦР в реальном времени идентифицировали SNP генов crh, npy, oprml. Для VNTR полиморфизма maoa и Indel-полиморфизма 5-htt проводили ПЦР-амплификацию с последующим ПДАФ-анализом. Формирование алкогольной мотивации проводили по описанной ранее методике [1].

У носителей одной или двух полиморфных G аллелей гена oprml (SNP 77 C>G), аллели с 7 повторами VNTR полиморфизма гена maoa и у носителей короткой аллели инсерционно-делеционного полиморфизма гена 5-htt выявлен значительно более высокий уровень потребления этанола по сравнению с животными, не имеющими данных генетических вариантов. Полученные результаты подтверждают важную роль мутантных аллелей генов oprml, maoa и 5-htt как факторов, определяющих алкогольную мотивацию и формирующих повышенный риск развития алкоголизма.

Литература.

1. Павлова Л.Е., Панченко Ал.В., Тимина М.Ф., Гвоздик Т.Е., Коваленко В.В., Агумава А.А., Панченко Ан.В. Генетика. 2022. Т. 58. № 4. С. 410-418.

РАЗРАБОТКА НОВОЙ ПРОТЕИНОВОЙ ПЛАТФОРМЫ С АДЬЮВАНТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ВАКЦИН

А.И. Полинова¹, М.В. Волкова¹, А.А. Горбунов¹, А.В. Серкина¹, Е.П. Санникова¹, И.И. Губайдуллин¹, М.Ю. Копаева², К.С. Плохих², Н.В. Булушова¹, Д.Г. Козлов¹

¹НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс
генетических исследований, almpolnova@mail.ru

²НИЦ «Курчатовский институт»

Пандемия COVID-19 ярко показала актуальность ускоренной разработки вакцин против новых патогенов. В связи с этим вырос интерес к развитию универсальных рекомбинантных платформ, обладающих собственной адьювантной активностью [1].

Целью работы являлась разработка оригинальной биосинтетической платформы для получения вакцин на основе самособирающихся антиген-презентирующих наночастиц (САПН). Субъединицами САПН служили фьюжн-белки, включавшие самоассоциирующийся пептид (САП) L₆KD, адапторный элемент и целевой антиген [2]. Адаптерный элемент отвечал за биосинтез и презентацию целевых антигенов на поверхности наночастиц, формирование «ядра» которых обеспечивал САП. В роли адапторного элемента испытывали белок SUMO и искусственный пептид perA1. Целевой антиген PhtD19 выбирали из числа пептидов пневмококка. Фьюжн-белки синтезировали в тельцах включения в клетках *E. coli*, подвергали их ренатурации и очистке, в ходе которых обеспечивали условия для самосборки. Эффективное образование САПН подтверждали методами динамического светорассеяния и трансмиссионной электронной микроскопии. Безадьювантная иммунизация мышей линии C57BL/6 путем двукратного внутрибрюшинного введения с интервалом 21 день показала, что оба типа САПН стимулировали образование IgG антител, распознающих целевой антиген. При этом САПН на основе пептида perA1 обеспечили на порядок более сильный PhtD19-специфичный гуморальный ответ, чем САПН на основе белка SUMO.

Таким образом, результаты исследования показали, что новая протеиновая платформа на основе пептида perA1 может служить основой для разработки безадьювантных вакцин.

Литература.

1. G.A. Roth, et al., Nat. Rev. Mater., 2022, vol. 7(3), p. 174-195.

2. A.A. Gorbunov, et al., Nanomedicine, 2022, vol. 17(7), p. 461-475.

СОЗДАНИЕ ГИБРИДНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ-ЛИПОСОМ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ ДОСТАВКИ РНК

Н.И. Пономарева^{1,2}, С.А. Брезгин^{1,2}, А.П. Костюшева¹, А.Ю. Егоршина¹, А. Пароди^{1,2}, О.В. Слатинская³, Е.О. Баюрова⁴, И.В. Гордейчук⁴, Г.В. Максимов³, П.А. Демина⁵, Е.В. Хайдуков⁵, Д.В. Соколова², В.С. Покровский², А.А. Замятнин^{1,2}, А.Н. Лукашев¹, В.П. Чуланов¹, Д.С. Костюшев^{1,2}.

¹ ФГАОУ ВО Сеченовский Университет, ponomareva.n.i13@yandex.ru

² Научно-технологический университет «Сириус»

³ МГУ имени М.В. Ломоносова

⁴ ФГАНУ «ФНЦИРИП им. М. П. Чумакова РАН»

⁵ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника»

Биологические наночастицы – перспективные инструменты для доставки терапевтических РНК. Их преимущества обусловлены высокой биосовместимостью, безопасностью, возможностью программирования поверхности. Однако, упаковка и доставка РНК в составе биологических наночастиц затруднена. Цель работы – создание технологий упаковки миРНК в биологические и гибридные наночастицы. В результате были получены различные варианты экзосом, экструзионных наночастиц, гибридных наночастиц и наночастиц с несколькими видами покрытий. Свойства наночастиц изучены с помощью динамического светорассеяния, вестерн-блоттинга, криоэлектронной микроскопии и ПЦР. Все типы частиц были правильной формы, однородны по размеру и экспрессировали характерные белковые маркеры. При инкубации с сывороткой крови мышей было зарегистрировано формирование белковой короны, что может как способствовать лучшему биораспределению, так и снижать эффективность целевой доставки. С помощью проточной цитофлуориметрии была проанализирована интернализация частиц *in vitro*, продемонстрирована эффективность доставки до 85-100% для отдельных видов частиц. Проведена оценка биораспределения *in vivo* и выявлены различия между вариантами гибридных и биологических наночастиц. На модели вируса гепатита В *in vitro* показана высокая эффективность доставки FAM-меченой РНК и противовирусной миРНК с подавлением основных параметров вирусной репликации. В результате, разработаны технологии для упаковки терапевтических РНК в биологические наночастиц, проведена их всесторонняя характеристика. Работа выполнена в рамках гранта РФФ 20-15-00373.

ВНЕСЕНИЕ ДЕЛЕЦИЙ В ГЕНОМ *BACILLUS SUBTILIS* С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИСТЕМЫ РЕПАРАЦИИ НЕГОМОЛОГИЧНОГО СОЕДИНЕНИЯ КОНЦОВ

Прозоров А. И.^{1,2}, Гнучих Е. Ю.¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс
генетических исследований, gnuchih_evgeniy@mail.ru

² Московский политехнический университет, кафедра ХимБиотех
prozorovartem15@gmail.com

В работе продемонстрировано, что в клетках *B. subtilis* реализуется малоизученный механизм редактирования генома - репарация двуцепочечного разрыва хромосомы по пути негомологичного соединения концов, без участия гомологичной ДНК, с образованием вставок и делеций неконтролируемого размера в заданном локусе. Двуцепочечный разрыв хромосомы вносится в запрограммированных местах с использованием ранее созданной системы CRISPR/Cas12a. Показано, что эффективность репарации через негомологичное соединение концов примерно на два-три порядка ниже, чем репарация по пути гомологичной рекомбинации.

Представленный метод может быть полезен для легкого внесения делеций, так как не требует клонирования на систему редактирования плечей для гомологичной рекомбинации, что сокращает процесс получения делеционных мутантов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Грант № 075-15-2019-1659)

ПЕПТИДНЫЙ ПРЕПАРАТ СЕЛАНК И ЕГО ВОЗМОЖНЫЕ ГЕНЕТИЧЕСКИЕ МИШЕНИ В МОЗГЕ КРЫС В РАННИЕ ЧАСЫ ПОСЛЕ ЦЕРЕБРАЛЬНОЙ ИШЕМИИ

Ю.А. Ремизова, И.Б. Филиппенков, В.В. Ставчанский, А.Е. Денисова*,
Л.В. Губский*, Н.Ф. Мясоедов, С.А. Лимборская, Л.В. Дергунова

НИЦ Курчатовский институт, utoshkautoshka@gmail.com
*ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России

Терапия инсульта крайне ограничена низкой эффективностью лекарств и коротким интервалом их применения. Пептид селанк (ThrLysProArgProGlyPro), аналог эндогенного тафтцина, вошел в клиническую практику в качестве анксиолитического агента, работающего как позитивный аллостерический модулятор [1]. Однако нейроактивность селанка может быть более широкой и проявляться в условиях сильного повреждения неврологических функций, таких как инсульт. В условиях модели обратимой окклюзии средней мозговой артерии (tMCAO) под контролем магнитно-резонансной томографии, мы исследовали изменения экспрессии генов в мозге крыс, вызванные введением селанка, в ранние часы после ишемии. С помощью RNA-Seq дорсолатеральных участков лобной коры крыс, содержащих зону пенумбры, через 4,5 ч после tMCAO были выявлены 118 дифференциально экспрессированных генов (ДЭГ) с кратностью изменений $>1,5$ и $padj < 0,05$ после введения селанка (200мкг/кг) по сравнению с действием физраствора. Большая часть ДЭГ (99) снизили экспрессию при действии пептида. Вместе с тем 60 из них (*C1qc*, *RT1-Va*, *Cd68*, *Cd74* и др.) повысили уровень при действии самой ишемии. Таким образом, селанк существенно снизил вызванные ишемией нарушения профиля экспрессии данных генов, проявив компенсирующий эффект. Дальнейший функциональный анализ (GSEA) выявил активность селанка в отношении генов систем передачи сигнала с помощью G-белков, а также иммунитета – процессинга и презентации антигенов и системы комплемента. Таким образом, селанк, действительно, может регулировать процессы, вызванные инсультом, на молекулярно-генетическом уровне. Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 19-14-00268-П.

Литература.

1. T.V. Vyunova, et al., Protein. Pept. Lett., 2018, 25(10), p. 914-923.

МОДИФИКАЦИЯ ГЕНОВ БИОСИНТЕЗА L-ВАЛИНА
ДЛЯ ПРОДУКЦИИ L-ВАЛИНА
У РАЗНЫХ ШТАММОВ *CORYNEBACTERIUM GLUTAMICUM*

В.В. Розанцева, М. Е. Шереметьева, К.Э. Ануфриев, Т.Е. Леонова,
Т.И. Калинина, А.С. Яненко

НИЦ «Курчатowski институт», Курчатowski комплекс генетических исследований, v.rozantseva@bk.ru

L-валин – незаменимая аминокислота, широко применяемая в животноводстве: ее добавление в корма приводит к повышению качества и количества мяса поросят и цыплят-бройлеров. Рост спроса на сельхозпродукцию ведет к росту мирового рынка L-валина, но в РФ эта аминокислота пока не производится. Создание такого производства – важный аспект продовольственной безопасности нашей страны.

Самый выгодный способ получения аминокислот, включая L-валин – биотехнологический. Ключевой элемент биотехнологий – штаммы-продуценты. Один из лучших базовых микроорганизмов для создания таких штаммов – *Corynebacterium glutamicum*. Основной современный метод создания продуцентов – рациональная метаболическая инженерия, то есть модификация генов с известными функциями для повышения выхода целевого продукта. Имеющиеся данные о биохимии и генетике *C. glutamicum* позволяют выделить ряд стратегий для повышения выхода L-валина: 1) усиление реакций его биосинтеза; 2) увеличение в клетках пула предшественника L-валина пирувата и кофактора НАДФН; 3) минимизация образования побочных продуктов (изолейцина, лейцина и др.); 4) изменение транспортеров для эффективного выведения L-валина из клеток

В этой работе рассматривается применение первой стратегии для улучшения характеристик двух линий штаммов *C. glutamicum*, способных продуцировать L-валин – линии штамма, полученного ненаправленным мутагенезом, и линии штамма, продуцирующего L-лизин. Изменение генов *ilvBNC* и *ilvE*, кодирующих ферменты биосинтеза L-валина, в обоих случаях позволило увеличить продуктивность штаммов. Однако эффект одинаковых модификаций в штаммах разных линий был разным, что объясняется влиянием разного генетического, а значит, и метаболического фона. Полученные данные говорят о том, что создание штамма-продуцента требует экспериментальной работы для подбора нужных модификаций даже тогда, когда основой служит хорошо изученный микроорганизм.

Финансовая поддержка исследования: Министерство науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2019-1659).

БИОСЕНСОР КАК ИНСТРУМЕНТ АНАЛИЗА ПРОДУКТИВНОСТИ ВАЛИНА В *C. GLUTAMICUM*

А.А. Самарин, Д.Д. Дербииков, А.С. Яненко

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, artem-samarin@mail.ru

Валин является протеиногенной аминокислотой, используемой в сельском хозяйстве и медицине [1]. Для детекции и определения уровня этой аминокислоты в штаммах *C. glutamicum* – продуцентах валина, перспективно использование валинового биосенсора [1].

На основе транскрипционного регулятора Lgr и флуоресцентного белка TurboYFP был сконструирован валиновый биосенсор pNS2-SV, реагирующий на содержание этой аминокислоты в клетках.

Сенсор трансформирован в штаммы *C. glutamicum* с различным содержанием валина. При этом показано, что при увеличении продуктивности с 0 до 18-23 г/л уровень флуоресценции увеличивается с $5 \cdot 10^3$ ед. до $3 \cdot 10^4$. На проточном цитофлуориметре четко видно наличие двух популяций, различающихся уровнем флуоресценции.

Также создан модельный штамм *C. glutamicum* KA1 с интегрированным в хромосому валиновым сенсором. В него дополнительно были внесены делеции гена *ilvA* и генов *panBC* и *leuA*. При этом флуоресценция мутантных штаммов увеличилась и была тем выше, чем больше продуктивность по валину.

Полученные результаты могут найти сферу применения в области биотехнологии, направленной на получение валиновых штаммов-продуцентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Грант № 075-15-2019-1659).

Литература.

1. Mustafi N, Grünberger A, Kohlheyer D, Bott M, Frunzke J. The development and application of a single-cell biosensor for the detection of l-methionine and branched-chain amino acids. *Metab Eng.* 2012 Jul;14(4):449-57.

2. Han G., Xu N., Sun X., Chen J., Chen C., Wang Q. Improvement of l-Valine Production by Atmospheric and Room

Temperature Plasma Mutagenesis and High-Throughput Screening in *Corynebacterium glutamicum*. ACS Omega 2020, 5, 10, 4751–4758. March 6, 2020

ГЕНОМНЫЕ И ПОСТГЕНОМНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СОВЕРШЕНСТВОВАНИИ СОРТИМЕНТА АБРИКОСА

Э. С. Сеитмамутова^{1,2}, А.В. Синченко^{1,2}, П.А. Хватков^{1,2,3}, С.В.
Долгов^{1,2,3,4}

¹ФГУН «Никитский ботанический сад - Национальный научный центр» РАН», edie.seitmamutova.97@bk.ru

²Курчатовский Геномный Центр – НБС – ННЦ

³ФГУН «Всероссийский научно-исследовательский институт сельскохозяйственной биотехнологии»

⁴Филиал ФГУН Института биоорганической химии им. акад. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Последние десятилетия промышленное производство абрикоса столкнулось с серьезными экономическими проблемами, связанными с повсеместным распространением вируса оспы сливы (PPV), вызывающим болезнь Шарка [1].

Создать полностью устойчивые формы абрикоса к этому заболеванию традиционными методами селекции невозможно. Повысить устойчивость растений к PPV позволяет технология интегрирования в геном растения РНК – интерференционной кассеты к гену белка оболочки вируса [2].

В ходе исследований методом генетической модификации с эффективностью трансформации для сорта Киото в 32,2%, Крокус – 47,5%, Искорка Тавриды – 13,8%, Южанин – 30,7 % были получены 67 независимых трансгенных линий химерных растений сортов абрикоса, путем формирования корневой системы, экспрессирующей РНК интерферирующие последовательности к гену белка оболочки вируса Шарки сливы.

Для подтверждения стабильной интеграции генов в геном растений в настоящее время ведутся молекулярно - биологические исследования.

Литература.

1. Garcia J. A. et al. Plum pox virus and sharka: a model potyvirus and a major disease// Mol. Plant Pathol. – 2014. –№15 (3) - pp. 226-241.
2. Долгов С.В. и др. Использование последовательности гена белка оболочки вируса шарки для создания устойчивых форм сливы (*Prunus domestica* L.) // Садоводство и виноградарство. - 2022. - № 2. - с. 32-41.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ АМИНОКИСЛОТНОГО ОСТАТКА,
ОТВЕТСТВЕННОГО ЗА ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ
ЭНДОГЛЮКАНАЗЫ СЕМЕЙСТВА GH12
ИЗ *THIELAVIA TERRESTRIS*

О.В. Березина, С.В. Рыков, А.И. Селимзянова*

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, selimz.alina99@mail.ru

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), кафедра молекулярной и клеточной биологии

Эндогликаны семейства GH12 используются при подготовке кормов для животных на основе растительной биомассы. Исследование термостабильных ферментов особенно актуально, так как корма часто подвергаются тепловой обработке в процессе приготовления. Изучение структурных основ термостабильности белков позволит определить мишени для модификаций, направленных на улучшение свойств ферментов, методами белковой инженерии.

Целью данной работы была идентификация аминокислотного остатка, ответственного за термостабильность эндогликаназы Egh12 из термофильного гриба *Thielavia terrestris* [1]. В работе [2] было определено, что термостабильность целлюлазы Cell12A из *Hypocrea jecorina* повышается при введении валина в положение 35 аминокислотной последовательности этого фермента.

Нами был получен мутантный вариант эндогликаназы Egh12 с заменой гомологичного остатка валина в положении 41 на серин. Дикий и мутантный варианты фермента Egh12 были синтезированы в *E. coli*. Измерение ферментативной активности методом с ДНС-реактивом в диапазоне температур от 60 до 85°C и pH от 4 до 6 показало, что замена V41S приводит к снижению температурного максимума активности Egh12 с 70°C, pH 4.6 до 60°C, pH 4.0. Таким образом, показано, что валин в положении 41 ассоциирован с высокой термостабильностью эндогликаназы Egh12 из *Thielavia terrestris*.

Литература.

1. S.V. Rykov, et al., Appl. Microbiol. Biotechnol., 2022, 106(4), p. 1493-1509.
2. M. Sandgren, J. Ståhlberg, C. Mitchinson, Prog. Biophys. Mol. Bio., 2005, 89, p. 246-291.

ПОИСК И ИЗУЧЕНИЕ БИОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВОЙ ГЛЮТЕНАЗЫ ПШЕНИЦЫ

А.Д. Солонкина¹, А.А. Сахаров¹, О.Е. Чепикова^{1,2}, Н.В. Гороховец¹,
А.А. Замятнин^{1,2}

¹ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России
(Сеченовский Университет)

²АНО ВО «Университет «Сириус»

Одним из перспективных препаратов для энзимотерапии целиакии является цистеиновая протеиназа пшеницы *Triticum aestivum* L. тритикаин- α , расщепляющая глютен на короткие пептиды. Целью исследования был поиск белка, способного расщеплять глютен более эффективно, чем тритикаин- α .

Для последовательностей, схожих с цистеиновыми протеиназами пшеницы, было проведено гомологичное моделирование структуры и оценка сродства к субстратам PLVQ-X, PQPQ-X, VLPQ-X, X = LPYP. По результатам докинга была выбрана протеиназа с Uniprot-идентификатором A0A3V6JDP7 (далее - P7), поскольку она имеет наибольшую энергию связывания с указанными выше лигандами, а расстояние от карбонильного атома 4-го аминокислотного остатка в пептиде до атома серы в остатке цистеина в активном центре протеиназы минимально.

Из корней и стеблей проростков пшеницы *T. aestivum* была выделена тотальная РНК, далее методом ОТ-ПЦР была синтезирована кДНК P7. В качестве вектора для клонирования использовалась плазида pET28/22, последовательность, кодирующая белок, была помещена в плазмиду по сайтам *EcoR I* и *Nhe I*. Белок был экспрессирован в штамме Rosetta gami В *E.coli*.

В результате был получен очищенный фермент, который активируется по аутокаталитическому механизму. Показано, что P7 специфично расщепляет глютен в диапазоне pH 2,5-5,5 и температуре 37°C, что делает возможным применение фермента для разрушения токсичных глютеиновых пептидов в пищевых продуктах.

Литература

1. Glutenase and collagenase activities of wheat cysteine protease Triticain- α : Feasibility for enzymatic therapy assays; Lyudmila V. Savvateeva, et al., Int J Biochem Cell Biol, 2015

ИЗУЧЕНИЕ ТРАНСПОРТА L-ТРЕОНИНА И L-СЕРИНА В *ESCHERICHIA COLI* K-12

Д.М. Бубнов¹, Т.В. Выборная¹, М.Д. Кудина¹, Е.Д. Плисов², С.П.
Синеокий¹ А.А. Степанова¹, А.А. Хозов^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский Институт», Курчатовский комплекс
генетических исследований, agnessastepanova87@gmail.ru
²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

В настоящей работе мы сообщаем о роли и свойствах продукта гена *yifK* как нового транспортера аминокислот в клетках *E.coli* K-12. Мы провели фенотипический и биохимический анализ, результаты которого показали, что YifK является пермеазой, специфичной по отношению к L-треонину и, в меньшей степени, L-серину. Исследование влияния ионофоров и состава реакционной смеси на транспортную активность показывает, что YifK использует электрохимический градиент протонов в качестве источника энергии для активного транспорта субстратов. Для идентификации оставшихся транспортеров треонина, активных в *yifK*-мутанте, мы провели скрининг геномной библиотеки и обнаружили, что *brnQ* способен выступать многокопийным супрессором дефекта по транспорту треонина, вызванного инактивацией YifK. Наши результаты свидетельствуют, что BrnQ непосредственно вовлечён в процесс транспорта как низкоаффинный транспортер, который становится основным путём проникновения треонина в клетку при высоких концентрациях субстрата. Устранив активность YifK и BrnQ, мы выявили и количественно оценили активность АТФ-зависимого ABC-транспортера LIV-I по отношению к треонину, а также продемонстрировали, что LIV-I вносит существенный вклад в поглощение последнего, но он, вероятно, меньше чем у YifK. Мы также обнаружили активность LIV-I по отношению к серину, но она была значительно ниже по сравнению с активностью серин-специфичного транспортера SdaC, что указывает на то, что LIV-I вносит незначительный вклад в поглощение серина. Полученные результаты позволяют нам предложить комплексную модель подсистемы транспорта треонина и серина в клетках *E.coli*.

Литература:

1. Robbins, J. C., and Oxender, D. L. Transport systems for alanine, serine, and glycine in *Escherichia coli* K-12. *J Bacteriol*, 1973, 116, 12–18.

РЕДАКТИРОВАНИЕ ГЕНОМА МЕТИЛОТРОФНЫХ ДРОЖЖЕЙ *KOMAGATAELLA PHAFFII* ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ШТАММОВ- РЕЦИПИЕНТОВ С ВЫСОКИМ ЭКСПРЕССИОННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

А.А. Ткаченко, С.П. Синеокий, Т.Л. Гордеева

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, artur.tka4enko10@gmail.com

С использованием системы CRISPR/Cas9 получен штамм-реципиент *K. phaffii* ВКПМ Y-5014, ауксотрофный по лейцину. Проведена оценка эффективности инактивации гена *LEU2* с использованием различных вариантов гидовых РНК. На основе полученного штамма разработан безмаркерный штамм-продуцент фитазы *Citrobacter gillenii* с продуктивностью более чем в 2,5 раза превышающей продуктивность контрольного штамма, полученного на основе коммерческого штамма *K. phaffii* GS115.

Отсутствие генов антибиотикорезистентности и высокая продуктивность трансформантов, получаемых на основе штамма *K. phaffii* ВКПМ Y-5014, относительно продуктивности трансформантов коммерческого штамма *K. phaffii* GS115, подтверждают высокий экспрессионный потенциал штамма *K. phaffii* ВКПМ Y-5014 и возможность его дальнейшего использования для конструирования рекомбинантных штаммов-продуцентов ферментов.

Рис.1 Эффективность инактивации гена *LEU2* с использованием различных гидРНК

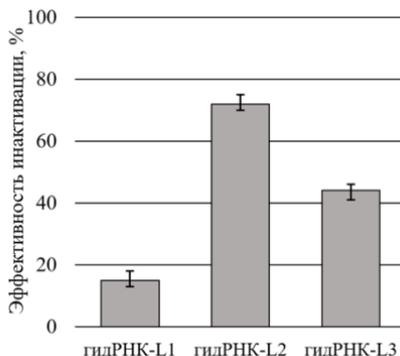


Таблица 1. Средняя продуктивность трансформантов

Штамм	Средняя продуктивность трансформантов, ед/мл
GS115	118
Y-5014	307

ВЛИЯНИЕ 6S-1 РНК *BACILLUS SUBTILIS*
НА ТРАНСКРИПЦИЮ ГЕНОВ СУРФАКТИН-СИНТЕТАЗЫ
И СИНТЕЗ СУРФАКТИНА

Трефилов В.С.¹, Буренина О.Ю.², Елкина Д.А.³, Зверева М.Э.¹,
Кубарева Е.А.³

¹Московский государственный университет имени М.В.

Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

²Сколковский институт науки и технологий (Сколтех), Москва, Россия

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

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

trefilov.vadik@gmail.com

Сурфактин – это циклический липопептид, состоящий из гептапептидного циклического участка и остатка жирной кислоты (C14-C15). Благодаря своей структуре, он обладает большой поверхностной активностью и может стать более экологичной альтернативой используемых в настоящее время ПАВ. В то же время сложность структуры сурфактина делает нерентабельным его химический синтез и единственным путем получения этого соединения является микробиологический синтез. Разработка штаммов-суперпродуцентов сурфактина позволит повысить доступность сурфактина для различных сфер его применения, что позитивно скажется на экологии и существенно понизит риск загрязнения ПАВ окружающей среды.

В процессе работы мы исследовали влияние нокаута гена 6S-1 РНК на биосинтез сурфактина клетками *B. subtilis* двух штаммов (лабораторного РУ79 и выделенного из почвы дикого NCIB 3610). Показано, что для обоих штаммов в поздней стационарной фазе роста клеток нокаут гена 6S-1 РНК приводит к повышению уровня мРНК всех генов оперона *surfA*, кодирующего сурфактин-синтетазу.

Установлено, что штамм РУ79 не способен производить сурфактин из-за наличия мутации в гене *sfp*, кодирующем необходимую для биосинтеза сурфактина 4'-фосфопантетеинил трансферазу. Штамм NCIB 3610 интактен по гену *sfp* и поэтому способен синтезировать сурфактин. Делеция гена 6S-1 РНК в бактерии NCIB 3610 не влияет на эффективность синтеза сурфактина.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2021-1396.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДРОЖЖЕВОЙ МИКРОФЛОРЫ ОСЕТИНСКИХ СЫРОВ

Е.С. Наумова, А.М. Пономарева*, А.Ю. Туаева

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, tuaeva_97@bk.ru

*ФГБОУ ВО "РХТУ им. Д.И. Менделеева"

Дрожжи принимают активное участие в процессах, происходящих в сыре при созревании, образуя широкий спектр ферментов, способных модифицировать компоненты сырной массы, тем самым влияя на структуру и органолептические показатели готового продукта [1]. Изучение дрожжевой микрофлоры осетинского сыра, относящегося к рассольным полутвердым сырам, имеет не только научный, но и большой прикладной интерес в связи с неуклонным ростом его популярности у потребителей. Изменения физико-химических и вкусоароматических свойств осетинского сыра при его созревании зависят не только от микроорганизмов, привнесенных с молоком, но и от микрофлоры закваски, которую осетины традиционно готовят из высушенного говяжьего желудка.

Мы изучили дрожжевую микрофлору 25 осетинских сыров различной степени зрелости, произведенных в разных регионах Северной и Южной Осетии. Для сравнения использовали образцы разных типов сыров, произведенных в России и Турции. Из изученных образцов было выделено 62 штамма, отнесенных к 10 родам и 15 видам. Доминирующими оказались утилизирующие лактозу (Lac^+) дрожжи родов *Kluyveromyces* и *Debaryomyces*, а также Lac^- дрожжи *Saccharomyces cerevisiae*, *Pichia spp.*, *Candida spp.* В отдельных образцах присутствовали: *Torulaspora delbrueckii*, *Kazachstania unispora*, *Clavispora lusitaniae*, *Yarrowia lipolytica*, *Galactomyces geotrichum*.

Сравнительный анализ показал, что состав микрофлоры осетинских сыров более разнообразен. В других типах сыров полностью отсутствовали дрожжи *S. cerevisiae*, *P. kudriavzevii*, *D. subglobosus*, *K. unispora* и *T. delbrueckii*. Микрофлора осетинских сыров характеризуется преобладанием *Kluyveromyces lactis*, тогда как в других типах сыров обнаружен другой вид этого рода: *K. marxianus*.

Литература.

1. Банникова Л.А., Королева Н.С., Семенихина В.Ф.,
Микробиологические основы молочного производства М.:
Агропромиздат, 1987, с. 400.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ ПРИ КОНСТРУИРОВАНИИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

С. А. Федорова

Липецкий государственный технический университет,
sofya-fedorova-2014@mail.ru

Во время решения производственных задач часто возникает вопрос при подборе гиперпараметров сети, независимо от типа задачи [2]. Ручной подбор – долгий процесс, занимающий рабочее время. Поэтому возникает идея автоматизации подбора архитектуры нейронной сети с использованием генетического алгоритма [1]. Он направлен на поиск оптимального решения задачи, отражает процесс естественного отбора наиболее подходящего элемента.

Готовые решения довольно ресурсно-затратные, зачастую они реализуют полный перебор структур и минимизируют вмешательство пользователя, что не всегда удобно.

Предлагается следующий алгоритм для решения задачи:

1. Пользователь задает начальное количество простых нейронных сетей (под простыми понимаются сети, имеющие минимальное количество скрытых слоев и небольшое количество нейронов) с фиксированными функциями потерь и весами нейронов.
2. Получаются предсказания этих сетей и вычисляется ошибка [3].
3. Сети с большей ошибкой удаляются из списка.
4. Оставшиеся сети подвергаются модификации: удаляется/восстанавливается связь между нейронами, добавляется внутренний слой, меняется функция активации.
5. Повторяются шаги 2-4, пока точность обученных моделей не перестанет улучшаться или пока не будет достигнута заданная точность.

Данное решение помогает сократить время подбора модели.

Литература.

1. Данилов В. В., Бабичева М. В. Нейронные сети: учебное пособие Донецк, ДонНУ, 2020, с. 158.
2. Миронов А. М. Машинное обучение: учебное пособие М, МАКС Пресс, 2018, с. 21.
3. Шолле Ф. Глубокое обучение на Python Спб, Питер, 2018, с.

ПОЛУЧЕНИЕ КАНТАКСАНТИНА НА ДРОЖЖАХ *YARROWIA LIPOLYTICA*

Ю.М. Федяева, М.О. Таратынова, В.А. Горчакова, С. П. Синеокий,
Е.Ю. Юзбашева *

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, juliya753k@gmail.com

* БиоКаи инк.

Кантаксантин - важный каротиноидный пигмент, обладающий антиоксидантными и противовоспалительными свойствами [1]. Его широко используют в пищевой, косметической и фармацевтической промышленности, а также в кормах для животных. Получение кантаксантина биотехнологическим путем имеет экономическую и экологическую значимость.

Целью работы являлось создание с помощью генетической инженерии штамма дрожжей *Y. lipolytica*, продуцирующего кантаксантин. Это было достигнуто путем оптимизации мевалонатного пути, введения мутантного варианта гена *ERG20(F88C)*, кодирующего фермент фарнезилпирофосфат синтазу, гетерологичных генов пути синтеза β -каротина *CarB* и *CarRP* *Mucor circinelloides*, кодирующих фермент фитоендегидрогеназу и бифункциональный фермент фитоен-синтазу/ликопин β -циклазу соответственно, гена *GGPPs7* *Synechococcus* sp., кодирующего геранилгеранилпирофосфат синтазу, а также гена *HpBKT* *Haematococcus pluvialis*, кодирующего фермент бета-каротин-кетоллазу, участвующий в синтезе кантаксантина.

Таким образом, введение в геном дрожжей *Y. lipolytica* генов мевалонатного пути и пути синтеза β -каротина, а также введение 3-х копий гена *HpBKT* привело к продукции 145.2 мг/л кантаксантина при культивировании в колбах.

Литература:

1. В. А. Rebelo, et al., R. Abranches. Plants (Basel), 2020, p. 1039.

ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ГЕНОМИКА НА ПУТИ К ДОСТИЖЕНИЮ НЕЙРОПРОТЕКЦИИ ПРИ ИНСУЛЬТЕ

И.Б. Филиппенков, Ю.А. Ремизова, И.В. Мозговой, В.В. Ставчанский,
А.Е. Денисова*, Л.В. Губский*, С.А. Лимборская, Л.В. Дергунова

НИЦ Курчатовский институт, filippenkov@img.msk.ru
*ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России

Одной из основных задач в решении проблемы инсульта является разработка эффективных стратегий нейропротекции и способов управления процессами повреждения и регенерации клеток мозга. Ответом может стать использование потенциала неповрежденных тканей мозга, в том числе противоположного полушария, а также молекулярных инструментов, регулирующих генетическую активность клеток мозга. Молекулы РНК обладают чрезвычайно многообразием структуры и функции. Не исключено, что на базе применения свойств таких биомолекул может быть обеспечен качественно новый уровень в решении проблемы инсульта.

В своей работе в условиях обратимой модели ишемического инсульта у крыс мы впервые выяснили полногеномный профиль не только белок-кодирующих мРНК, но и тысяч регуляторных РНК, включая микроРНК и длинные некодирующие РНК циклической природы (циклоРНК) в мозге. Примечательно, что активность целого спектра РНК наблюдалась не только в поврежденном, но и в противоположном полушарии, содержащем здоровые клетки. Мы также выяснили метаболические системы, в рамках которых может реализовываться регуляция экспрессии генов в противоположном полушарии, и сформировали панели некодирующих РНК, характеризующих регуляцию наиболее значимых из выявленных сигнальных путей (фокальной адгезии, развития нервной системы и других). В работе также спрогнозированы сети между мРНК, микроРНК и циклоРНК, обладающие потенциалом регуляторной активности при ишемии.

В совокупности результаты существенно расширили представление об активности генома клеток мозга при инсульте. Были выявлены как отдельные молекулы РНК, так и их регуляторные сети, воздействуя на которые, мы, возможно, научимся управлять процессами повреждения и регенерации клеток мозга при ишемии. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта №21-34-70048.

РЕГУЛЯЦИЯ *LUX*-ОПЕРОНА БАКТЕРИЙ РОДА *PHOTORHABDUS*

С.В. Баженов, А.П. Зарубина, О.В. Конончук, И.В. Манухов,
В.О. Матвеева, С.Э. Спиридонов, В.В. Фомин

Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), кафедра биофизики,
fomin.vv@phystech.edu

Считается, что состоящий из генов люминесценции *lux*-оперон бактерий рода *Photorhabdus* является конститутивным [1]. Поэтому данный оперон используется как неспецифичный бактериальный биосенсор для измерений интегральной токсичности [2].

Исследования выделенного в Московской области природного штамма *Photorhabdus temperata* и клонированного из штамма *Photorhabdus luminescens* ZM1 *lux*-оперона [3] в гетерологичной системе *Escherichia coli* показали активацию экспрессии *lux*-оперона при росте температуры от 23 °С до 34 °С и 42 °С соответственно. Активация экспрессии *lux*-оперона наблюдается на транскрипционном уровне, что подтверждено RT-PCR. При инкубации в среде с добавлением этанола, экспрессия *lux*-оперона увеличивается в природном штамме *P. temperata*, но не в клетках *E. coli*. Это можно объяснить тем, что шапероны в гетерологичной системе *E. coli* не узнают промотор *lux*-оперона в отличие от нативного окружения в бактериях рода *Photorhabdus*. Также это может быть связано с плавлением вторичной структуры мРНК *lux*-оперона. Чтобы протестировать данную гипотезу, исследовали экспрессию *lux*-оперона в штаммах *E. coli* дефектных по генам *rpoH* и *rpoE*. В итоге индукция *lux*-оперона в дефектных штаммах *E. coli* сохраняется, что свидетельствует о наличии шпильки мРНК, хотя не объясняет активацию на спирт в клетках *P. temperata*.

Дальнейшее исследование механизмов регуляции *lux*-оперона может послужить основой для конструирования биосенсора специфичного к определенному типу клеточного стресса.

Литература.

1. A. Lojek, et al., *Folia Microbiol*, 2004, vol. 49, pp. 539-542.
2. I.V. Manukhov, et al., *Mutat. Res. Toxicol. Environ. Mutagen.*, 2007, vol. 634, pp. 172-176.
3. G.B. Zavil'gelskii, et al., *Genetika*, 2000, vol. 36, pp. 322-330.

Работа поддержана грантом РФФ 22-14-00124

ПОДБОР САЙТА СВЯЗЫВАНИЯ РИБОСОМЫ ГЕНА НУКЛЕАЗЫ
CAS9 СИСТЕМЫ CRISPR/CAS9 ДЛЯ РЕДАКТИРОВАНИЯ
БАКТЕРИЙ *BACILLUS SUBTILIS*

Гнучих Е. Ю.¹, Херай А. А.^{1, 2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс
генетических исследований, gnuchih_evgeniy@mail.ru

² Российский химико-технологический университет имени Д. И.
Менделеева, кафедра биотехнологии, khegay.anna00@mail.ru

В работе изучены эффекты сайтов связывания рибосомы на эффективность системы CRISPR-Cas редактирования генома *Bacillus subtilis*. Рандомные сигналы инициации трансляции [1] были встроены в последовательность праймера, частично комплементарного началу гена нуклеазы *cas9*. ПЦР продукты, содержащие случайные последовательности RBS, были клонированы сборкой Гибсона в плазмиду перед геном *cas9*. Эта плазида содержала все необходимые элементы системы CRISPR/Cas9, в том числе кодировала sgPHK, но не имела плечей для гомологичной рекомбинации. В результате была получена библиотека из 40 плазмид с различными последовательностями RBS.

По росту клеток был проведен скрининг вариантов RBS в условиях, обеспечивающих фоновую экспрессию нуклеазы *cas9* в состоянии без индукции промотора P_{xytA}-cre и при индукции в присутствии D-ксилозы. В результате был выбран оптимальный вариант RBS, обеспечивающий минимальный синтез нуклеазы Cas9 в состоянии без индукции, и достаточный по силе для образования эффекторного комплекса Cas9/sgPHK и внесения двуцепочечного разрыва ДНК при индукции в присутствии D-ксилозы.

Работа выполнялась в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» (номер АААА-А20-120093090015-2 от 30.09.2020).

Литература.

1. Gnuchikh, E.Y., Manukhov, I.V., et. al., *Biotechnology in Russia*, 2020, 36, 6.

ДИФФЕРЕНЦИАЦИЯ ПОДВИДОВ ТУЛЯРЕМИЙНОГО И ЧУМНОГО МИКРОБОВ, ЦИРКУЛИРУЮЩИХ НА ТЕРРИТОРИИ ГОРНОГО АЛТАЯ С ПОМОЩЬЮ MELT-МАМА ПЦР

К.В. Хлопова, И.В. Бахтеева, В.В. Евсева, В.С. Тимофеев

На территории горного Алтая существуют уникальные природные очаги чумы и туляремии. Возбудители этих инфекций - *Yersinia pestis* и *Francisella tularensis*, соответственно, представлены каждый двумя подвидами, которые отличаются по своему эпидемиологическому потенциалу. *Y. pestis* subsp. *pestis* способна вызвать чуму у людей, в то время как *Y. pestis* subsp. *microtus* bv. *altaica* вызывает инфекцию только у грызунов. *F. tularensis* subsp. *mediasiatica* более вирулентен для лабораторных животных, чем subsp. *holarctica*, но до сих пор не вызвал ни одного подтвержденного случая туляремии у людей. Соответственно, при выделении нового штамма *Y. pestis* и *F. tularensis* важной задачей является быстрое и точное определение его подвидовой принадлежности. Для этой цели нами были разработаны два набора олигонуклеотидов, предназначенные для детекции таксономически важных SNP методом анализа кривых плавления:

1) aataaatcaagatgatattggtaaagccg, cggggcggggcggggcgggcaataaatcaagatgatattggtaaaggca, atctttagtaatagcctttggaggtg, при температуре отжига 60°C пик кривой плавления у подвидов *F. tularensis* subsp *tularensis* и subsp *holarctica* составляет 80 °C, иногда 79,5 °C, а у подвида *mediasiatica* – 82°C; 2) cggggcggggcggggcgggccagttgatgacgggcttcagttacgc, cagttgatgacgggcttcagttcgt, gttgaggatatcgtctgcatgaaagtgtt, при температуре отжига праймеров 60 C° пик кривой плавления у *Y. pestis* subsp *pestis* составляет 87 °C, а у subsp *microtus* (bv. *altaica*) – 88,5°C. Используемый нами в данной работе метод детекции однонуклеотидных ДНК маркеров может быть применимым для решения гораздо более широкого круга задач, так как метод может быть успешно адаптирован для детекции практически любых SNP без проведения секвенирования.

ОЦЕНКА ТЕРМИНАЦИИ ТРАНСКРИПЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ В *RHODOCOCCLUS RHODOCHROUS*

М.С. Чуйко*, Е.Г. Гречишникова, К.В. Лавров, А.О. Шемякина, А.С. Яненко

НИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс генетических исследований, chuyko8642@gmail.com, lavrov.ko@gmail.com

* Московский физико-технический институт "МФТИ"

В работе изучалась эффективность новых терминаторов транскрипции в *R. rhodochrous* M8, платформенном микроорганизме для получения акриловых мономеров [1]. Использовались следующие фрагменты ДНК, кодирующие предполагаемые терминаторы транскрипции: 3Н из *R. rhodochrous* M8 в двух ориентациях, Т0 из колифага λ и контрольный фрагмент, не содержащий терминаторов транскрипции. Сконструированы плазмиды, содержащие каскеты вида «*cblA*-промотор-*gfp*-фрагмент-*rfp*», где *cblA* – ген кобальт-зависимого транскрипционного регулятора, промотор – промотор генов нитрилгидратазы из *R. rhodochrous* M8, фрагмент – один из исследуемых фрагментов, *gfp* и *rfp* – гены, кодирующие белки turboGFP и turboRFP. Степень терминации транскрипции рассчитывалась через соотношение красной и зелёной флуоресценций клеток. При обоих уровнях активности промотора с фрагментами Т0 и 3Н в одной из ориентаций степени терминации были сходны, около 60% и 47%, соответственно. Фрагмент 3Н в противоположной ориентации практически не терминировал транскрипцию.

Таким образом, впервые в *Rhodococcus* оценены степени терминации транскрипции, и открыты новые терминаторы. Данные терминаторы транскрипции можно использовать для контролируемого снижения экспрессии генов при конструировании продуцентов метаболитов и белков и при разработке цельноклеточных биокатализаторов.

Работа выполнялась в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» (номер АААА-А20-120093090015-2 от 30.09.2020).

Литература.

1. Novikov AD, Lavrov KV, Kasianov AS, Topchiy MA, Gerasimova TV, Yanenko AS. 2021. Complete genome sequence of *Rhodococcus* sp. strain M8, a platform strain for acrylic monomer production. *Microbiology Resource Announcements* 10:e01314-20.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КРОСС-СШИВАЮЩИХ РЕАГЕНТОВ НА ОСНОВЕ ЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КОНЬЮГАТОВ АНТИТЕЛО-ОЛИГОНУКЛЕОТИД

Т.П. Северинчик, В.В. Шманай

Институт физико-органической химии Национальной академии наук
Беларуси
tanyaseverinchik@gmail.com

Конъюгаты антитело-олигонуклеотид представляют собой новый класс синтетических химерных биомолекул, обладающих уникальными свойствами и находящих широкое применение в различных областях медицины и биотехнологии, включая визуализацию клеточных процессов, детектирование, адресную доставку и др. [1]. Одним из подходов к синтезу конъюгатов данного типа является предварительная функционализация обоих компонентов, например, азидной группой и фрагментом дибензоциклооктина, что далее позволяет получать конъюгаты при помощи реакции алкин-азидного циклоприсоединения, обусловленного напряженностью цикла [2].

В нашей лаборатории разработан метод синтеза несимметричных водорастворимых цианиновых красителей Су3 и Су5, содержащих функциональные группы для последующей модификации биомолекул (активированный эфир для модификации аминогруппы на белке и олигонуклеотиде, азидную группу или фрагмент бициклононина для последующего проведения реакции конъюгации). Введение флуоресцентных меток в исследуемые белки и олигонуклеотиды позволяет рассчитывать количество введенных функциональных групп, соотношение биообъектов в полученном конъюгате, а также, используя резонансный перенос энергии, отслеживать кинетику образования продукта.

Литература.

1. Dovgan, I., Koniev, O., Kolodych, S. A Wagner, A. Antibody-oligonucleotide conjugates as therapeutic, imaging, and detection agents. *Bioconjugate Chemistry*. 2019. Vol 30(10), pp. 2483–2501.
2. Wiener J., Kokotek D., Rosowski S. Preparation of single- and double-oligonucleotide antibody conjugates and their application for protein analytics. *Nature research*. 2020. 10:1457

ИЗМЕНЧИВОСТЬ ХЛОРОПЛАСТНОГО ГЕНОМА ПШЕНИЧНО-РЖАНЫХ АМФИДИПЛОИДОВ (\times *TRITICOSECALE* WITTM.)

Соколюк А.В.

Институт генетики и цитологии НАН Беларуси, Минск, Беларусь,
a.sokolyuk@igc.by

В настоящее время установлено, что генезис аллополиплоидных форм, каковыми является большинство высших растений, сопровождается кардинальными преобразованиями и модификациями ядерного генома, которые на ранних этапах стабилизации гибридной формы обеспечивают её цитологическую и генетическую диплоидизацию [1-3]. Между тем, образование аллополиплоидов всегда сопряжено с нахождением одного или более ядерных геномов в чужеродной цитоплазме, что приводит к ядерно-цитоплазматическому конфликту. Логично предположить, что в ходе разрешения этого конфликта структурным модификациям может подвергаться также пластом. В отличие от преобразований ядерного генома этот аспект стабилизации аллополиплоидных форм изучен крайне мало.

В своем исследовании мы поставили перед собой цель на примере пшенично-ржаных амфидиплоидов провести полногеномное сопоставление первичной структуры хлоропластной ДНК у гибрида и донора цитоплазмы, что позволит с высокой точностью выявить все изменения пластома, возникшие в процессе коадаптации ядерного и цитоплазматического геномов. Для достижения этой цели проведено NGS секвенирование хпДНК 10 сортов тритикале, культивируемых в Республике Беларусь, и выполнена сборка полных последовательностей хп-геномов путем выравнивания прочтений на референсный геном *Triticum aestivum* L. (G.B. KJ592713).

В ходе сравнительного анализа полученных последовательностей установлен высокий уровень изменчивости пластома пшенично-ржаных гибридов. При этом самым полиморфным оказалось семейство генов АТФазы, в котором детектировано 42 нуклеотидных замены, причем 11 из них в гене *atpA* являются идентичными для всех исследованных сортов.

Литература.

1. P.S. Soltis, et al., Proc. Nat. Ac. of S. USA, 2000, V 21(10), p. 539-543.
2. K.L. Adams, et al., Trends Genet., 2005, V 21(10), p. 539-543.
3. M. Feldman, et al., Cytogenet. Gen. Res., 2005, V 109(1-3), p. 250-258.

Секция 7.
Физика ядра и элементарных частиц,
астрофизика

РОЖДЕНИЕ ^{12}B , ^{12}N И ^{12}Be В ЗАРЯДОВО-ОБМЕННЫХ РЕАКЦИЯХ

А. А. Куликовская¹, Б. М. Абрамов¹, Ю. А. Бородин¹, С. А. Булычев¹,
И. А. Духовской¹, А. П. Крутенкова¹, В. В. Куликов¹,
М. А. Мартемьянов¹, М. А. Мацюк¹, Е. Н. Турдакина¹

¹НИЦ Курчатовский Институт, annkull316@mail.ru

В данной работе представлены результаты измерения реакций, проходящих с однократной и двукратной перезарядкой нуклонов при фрагментации ионов углерода при энергии 300 МэВ/нуклон. Экспериментальные данные были получены на установке ФРАГМ и многоцелевом ускорительном комплексе ИТЭФ-ТВН на тонкой бериллиевой мишени [1, 2].

Поиск производился для следующего набора изотопов, идущих с перезарядкой нуклонов: ^{12}B , ^{12}N и ^{12}Be . Дифференциальные сечения образования этих изотопов рассматривались как функции импульса фрагментов [3]. Измерения процессов перезарядки в этом диапазоне энергий выполнены впервые. Дополнительно оценивался верхний предел образования ионов ^{12}N .

Полученные данные рассмотрены в сравнении с предсказаниями моделей ядро-ядерных взаимодействий. Представленные результаты расширяют существующую базу данных о процессах ядерной фрагментации и дают новый материал для проверки теоретических моделей.

Литература.

1. Б.М. Абрамов и др., Phys. At. Nucl. 78, 373 (2015)
2. Б.М. Абрамов и др., EPJ Web Conf. 138, 03002 (2017)
3. А.А. Куликовская и др., Яд. Физ. 85, №5, 339 (2022)

ИЗУЧЕНИЕ НОВЫХ РАСПАДОВ B_c^+ МЕЗОНОВ С ЧАРМОНИЕМ И ЛЕГКИМИ АДРОНАМИ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ LHCb

Д.Ю. Перейма, А.В. Егорычев

НИЦ «Курчатовский Институт» - ККТЭФ, Dmitrii.Pereima@cern.ch

Уникальное состояние, состоящее из двух тяжелых кварков разных ароматов (анти- b и c -кварки), B_c^+ мезон, имеет обширный набор возможных каналов распада. Несмотря на то, что частица B_c^+ была открыта более 20 лет назад в эксперименте CDF, до сих пор было обнаружено лишь несколько мод распада этого состояния. Эксперименты на Большом адронном коллайдере ознаменовали новую эру для исследований B_c^+ мезонов, которые были недоступны в предыдущем поколении экспериментов на электрон-позитронных машинах.

Наиболее значимую роль в исследованиях в области спектроскопии прелестных и очарованных адронов на Большом адронном коллайдере играет эксперимент LHCb, который на данный момент является уникальной лабораторией, позволяющей исследовать весь спектр прелестных адронов и их возбужденные состояния, включая тяжелый кварконий - B_c^+ мезон. В докладе представлены последние результаты спектроскопии B_c^+ мезонов в эксперименте LHCb, полученные на данных, набранных с 2011 по 2018 гг.

ИНТЕГРИРУЕМЫЕ УРАВНЕНИЯ ЛАНДАУ-ЛИФШИЦА И ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВЫЕ ОБОБЩЕНИЯ СИСТЕМ ЧАСТИЦ

К. Р. Аталиков

НИЦ Курчатовский Институт, kantemir.atalikov@yandex.ru

В данной работе изучается $1+1$ -полевое обобщение рациональной модели Калоджеро-Мозера с N телами, которая калибровочно эквивалентна некоторому специальному матричному уравнению Ландау-Лифшица старшего ранга. Последнее уравнение описывается в терминах рациональной R -матрицы $GL(N)$, которая в случае $N = 2$ превращается в 11 -вершинную R -матрицу. Рациональная R -матрица удовлетворяет ассоциативному уравнению Янга-Бакстера, лежащему в основе построения пары Лакса. Предложен полевой аналог преобразования IRF-Vertex, который позволяет вычислить явную замену переменных между полевой моделью Калоджеро-Мозера и уравнением Ландау-Лифшица.

Литература.

1. K. Atalikov, A. Zotov, *Field theory generalizations of two-body Calogero-Moser models in the form of Landau-Lifshitz equations*, J. Geom. Phys., 164 (2021) 104161; arXiv:2010.14297 [hep-th].
2. K. Atalikov, A. Zotov, *Higher rank $1+1$ integrable Landau-Lifshitz field theories from associative Yang-Baxter equation*, JETP Lett. 115, 757-762 (2022); arXiv:2204.12576 [math-ph].
3. A. Levin, M. Olshanetsky, A. Zotov, *Relativistic classical integrable tops and quantum R -matrices*, JHEP 07 (2014) 012; arXiv:1405.7523 [hep-th].
4. M. Matushko, A. Zotov, *Anisotropic spin generalization of elliptic Macdonald-Ruijsenaars operators and R -matrix identities*, arXiv:2201.05944 [math.QA].
5. A. Zabrodin, A. Zotov, *Field analogue of the Ruijsenaars-Schneider model*, J. High Energ. Phys. 2022, 23 (2022); arXiv:2107.01697 [math-ph].

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕНЕРАТИВНО-СОСТЯЗАТЕЛЬНЫХ И ДИФFUЗИОННЫХ МОДЕЛЕЙ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИГНАЛА ГЕРМАНИЕВЫХ ДЕТЕКТОРОВ

Н. Д. Зарецкий, А. Е. Черногоров

НИЦ Курчатовский Институт, zaretskinikita@gmail.com

Моделирование сигнала детекторов с помощью нейронных сетей может послужить дополнением к процессу Монте-Карло моделирования, так как нейронные сети позволяют генерировать большой объем данных за малое время.

В данной работе проводится сравнение двух подходов для моделирования сигнала германиевых детекторов: диффузионных и генеративно-состязательных моделей нейронных сетей. Германиевые детекторы являются одним из самых популярных видов детекторов за счет своих спектрометрических свойств; они используются во многих экспериментах для детектирования заряженных частиц и гамма-квантов [1]. Обучение генеративно-состязательных нейронных сетей [2] является проблематичным, так как в процессе участвуют одновременно две модели (генератор и дискриминатор), поэтому, чтобы сделать обучение более стабильным, в работе особое внимание уделялось предварительной обработке данных для сокращения количества исходных признаков (в частности, использовался анализ главных компонент). Диффузионные модели [3] во многом превосходят генеративно-состязательные, однако они менее исследованы.

В докладе представлены принцип работы германиевых детекторов, описание генеративно-состязательного и диффузионного подходов к генерации данных, а также результаты моделирования с помощью обоих типов нейронных сетей. Для оценки полученных результатов использовались такие параметры, как амплитуда зарядового и токового импульсов, время нарастания и угол наклона «хвостовой» части сигнала.

Литература.

1. Абрамов А. И., Казанский Ю. А., Матусевич Е. М. Основы экспериментальных методов ядерной физики. - М.: Энергоатомиздат, 1985
2. I. J Goodfellow, et al., Generative Adversarial Networks, 2014

3. C. Luo, Understanding Diffusion Models: A Unified Perspective,
2022

РЕКОНСТРУКЦИЯ СОБЫТИЙ В ПРОТОТИПЕ НЕЙТРИННОГО ДЕТЕКТОРА СУПЕРFGD

М.А.Колупанова[1],[2], Ю.Г. Куденко[1],[2], А.В. Мефодьев[2]

^[1]Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет)

^[2]Институт ядерных исследований РАН

E-mail: kolupanova.ma@phystech.edu

Для дальнейшего исследования нейтринных осцилляций в рамках комплекса ND280 эксперимента T2K создается 3D сегментированный детектор СуперFGD, главной составляющей которого являются 2 миллиона сцинтилляционных кубиков объемом 1 см³, с тремя ортогональными отверстиями для спектросмещающих волокон WLS Kuraray Co Y-11. Структура детектора позволит регистрировать продукты взаимодействия нейтрино с веществом в диапазоне близкому к 4л и более низкой пороговой энергией, что улучшит точность измерения параметров осцилляций и повысит чувствительность поиска CP-нарушения в лептоном секторе.

С целью предсказания свойств детектора СуперFGD был создан и протестирован на адронном пучке T9 в северной зоне ЦЕРНа прототип размером 24×8×48 см³, состоящий из 1728 каналов, считывающих сигнал с помощью кремниевых фотоумножителей MPPC и печатных плат FEB, разработанных на базе чипов чипов CIPROC. Для изучения треков заряженных частиц в магнитном поле, прототип помещали в магнит MNP17, воссоздающий условия в комплексе ближних детекторов ND280.

В данной работе представлена реконструкция треков заряженных частиц, регистрируемых в прототипе детектора СуперFGD. Произведен расчет световыходов сцинтиллятора при остановленном протоне и рассчитан Cross-Talk. Результаты получены с помощью библиотек, входящих в программный комплекс ROOT.

Литература

1. Abe K. et al. The T2K experiment //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2011. – Т. 659. – №. 1. – С. 106-135.
2. Blondel A. et al. The SuperFGD Prototype charged particle beam tests //Journal of Instrumentation. – 2020. – Т. 15. – No. 12. – С. P12003.
3. Mineev O. et al. Beam test results of 3D fine-grained scintillator detector prototype for a T2K ND280 neutrino active target //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2019. – Т. 923. – С. 134-138.

ТОЧНОСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ОСЦИЛЛЯЦИЙ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ DUNE В СРАВНЕНИИ С ДРУГИМИ УСКОРИТЕЛЬНЫМИ НЕЙТРИННЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТАМИ С ДЛИННОЙ БАЗОЙ

А.В.Степанова

МГУ имени М.В.Ломоносова,

Объединённый институт ядерных исследований, as592454@gmail.com

Ускорительные нейтринные эксперименты с длинной базой состоят из ближнего и дальнего детекторов, в одном из которых регистрируется поток мюонных нейтрино от ускорителя, а во втором – реконструируются осцилляционные спектры появления электронных нейтрино и исчезновения мюонных. Эксперименты данного типа, NOvA [1] и T2K [2], направлены на изучения неизвестных параметров осцилляций нейтрино. На смену им разрабатывается проект мирового масштаба – эксперимент DUNE [3].

В настоящей работе были смоделированы спектры нейтрино дальних детекторов этих экспериментов и на их основе рассчитаны чувствительности к определению иерархии масс нейтрино и фазе δ_{CP} , а также построены совместные чувствительности NOvA, T2K и DUNE в программном обеспечении GNA [4]. Получено, что благодаря своим особенностям, в том числе новой технологии предсказания спектров дальнего детектора на основе данных, измеренных на внеосевых положениях ближнего детектора (DUNE-PRISM), DUNE сможет определить иерархию масс нейтрино через 2 года работы на уровне значимости 5σ , подтвердить или отклонить гипотезу о сохранении комбинированной чётности через 7 лет работы для 40% возможных значений δ_{CP} , а с данными NOvA и T2K – диапазон δ_{CP} увеличится до 60% значений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 22-22-00389.

Литература.

1. M. A. Acero et al. «Improved measurement of neutrino oscillation parameters by the NOvA experiment», [arXiv:2108.08219 [hep-ex]].
2. K. Abe et al. «Measurements of neutrino oscillation in appearance and disappearance channels by the T2K experiment with 6.6×10^{20} protons on target», [arXiv:1502.01550 [hep-ex]].
3. B. Abi et al. «Deep Underground Neutrino Experiment (DUNE), Far Detector Technical Design Report, Volume I Introduction to DUNE», [arXiv:2002.02967 [physics.ins-det]].

4. Global Neutrino Analysis, GNA gna.pages.jinr.ru/gna/

ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРОТОНА ЗА ПРЕДЕЛАМИ СТАНДАРТНОЙ МОДЕЛИ

Е.А. Крюкова

Институт ядерных исследований РАН,
МГУ им. М.В. Ломоносова, кафедра физики частиц и космологии,
kryukova.ea15@physics.msu.ru

Наблюдения за скоростью вращения видимого вещества в галактиках и многие космологические эксперименты говорят о необходимости расширения Стандартной модели физики элементарных частиц. Традиционно рассматривается так называемый скрытый сектор и частицы-медиаторы, которые могут взаимодействовать как с полями Стандартной модели, так и скрытого сектора. Существует три основных способа записать перенормируемое взаимодействие полей Стандартной модели с медиаторами: скалярный, векторный и фермионный порталы. В данной работе рассматривается векторный портал и соответствующий массивный медиатор-тёмный фотон.

В последние годы активно ведутся экспериментальные поиски тёмных фотонов. Для уточнения чувствительности таких планируемых и предложенных экспериментов с фиксированной мишенью, как DUNE, T2K и SHiP, требуется изучить процесс рождения тёмного фотона в pp -столкновениях. Наибольшие трудности вызывает оценка сечения рождения в области масс тёмного фотона 0,5-1,5 ГэВ в процессе протонного тормозного излучения. Известные в литературе результаты дают ответы, не согласующиеся друг с другом по величине на 1-2 порядка [1, 2].

В докладе будет дана оценка сечения рождения тёмного фотона в упругом процессе $pp \rightarrow pp\gamma'$ для диапазона масс 0,4-1,75 ГэВ. Вычисления будут проведены с учётом ненулевого переданного импульса без широко используемого приближения Вайцзеккера-Вильямса [3].

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» № 21-2-10-37-1.

Литература.

1. J. Blumlein, J. Brunner, Phys. Lett. B 731, 320-326 (2014).
2. S. Foroughi-Abari, A. Ritz, Phys. Rev. D 105 no.9, 095045 (2022).
3. K. J. Kim, Y. S. Tsai, Phys. Rev. D 8 (1973), 3109.

МАКЕТ ПЭТ НА ОСНОВЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ДЕТЕКТОРОВ GAGG(Ce)-Si ФЭУ

Н.С. Бойко^{1,2}, Ф.А. Дубинин^{2,3} Г.Д. Долганов¹, В.Д. Торохов¹, В.Ю.
Шаламова

¹ Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»,
nrcki@nrcki.ru

² Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ»,
press@mephi.ru

³ Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии
наук, aspirantura@lebedev.ru

Представлено описание макета позитрон-эмиссионного томографа (ПЭТ), спроектированного на основе новых сцинтилляторов GAGG(Ce) [1], Si-ФЭУ (кремниевых фотоумножителей) SensL FC-30035 [2] и 32-канального анализатора PETIROC2A. Целью разработки является исследование эффективности работы макета ПЭТ данной конфигурации для оценки возможности будущего внедрения технологии в медицину. Описаны преимущества выбранных материалов и электронных компонент для его изготовления. Приведены результаты измерений энергетического разрешения готового макета и рабочих характеристик [3] электроники для оптимальной работы прибора.

Литература

1. Jeong M., Hammig M. Development of hand-held coded-aperture gamma ray imaging system based on GAGG(Ce) scintillator coupled with SiPM array // Nuclear Engineering and Technology. — 2020. — Т. 52, No 11. — С. 2572—2580.
2. Sensors C.-S. S. Silicon Photomultipliers (SiPM), Low-Noise, Blue-Sensitive // On Semiconductor. — 2020.
3. Background removal procedure based on SNIP algorithm for gamma ray spectroscopy with the CAEN Educational Kit / M. Caccia [и др.] // Viareggio, Italy, Oct. — 2017.

СИГНАЛ ОТ АНТИНЕЙТРИНО В ДЕТЕКТОРЕ iDREAM НА КАЛИНИНСКОЙ АЭС

И.Н. Жутиков

НИЦ Курчатовский Институт, ivan.zhutikov.99@inbox.ru
Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Детектор iDREAM был разработан для решения прикладных задач атомной отрасли, связанных с мониторингом состояния активной зоны реактора и накопления плутония по потоку антинейтрино. Близкое расположение детектора к реактору и способность измерять спектр антинейтрино делают его пригодным и для ряда фундаментальных задач, таких как изучение спектральной аномалии реакторных антинейтрино и исследование осцилляций антинейтрино в стерильное состояние.

В данной работе был проведён анализ первых данных детектора, набранных в 2021-22 гг. Полученная в результате скорость счёта антинейтрино показывает корреляцию с мощностью реактора. На рис. 1 слева представлена полученная скорость счёта антинейтрино и график мощности. Справа показана взвешенная с мощностью скорость счёта в зависимости от меняющейся в ходе выгорания топлива доли деления ^{239}Pu . Полученное падение скорости счёта антинейтрино составляет $\sim 6\%$ и находится в согласии со значением, вычисляемым на основе имеющихся данных по спектрам реакторных антинейтрино [1,2].

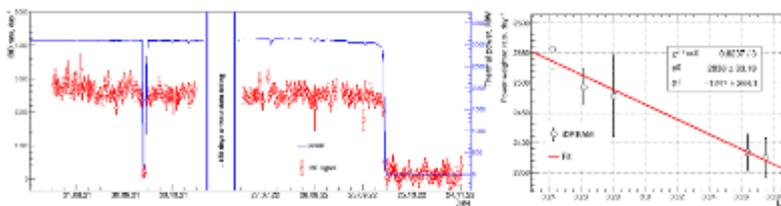


Рис. 1 Скорость счёта детектора в зависимости от времени и доли деления ^{239}Pu .

Литература.

1. V. Kopeikin, M. Skorokhvatov, and O. Titov, Phys. Rev. D 104, L071301 (2021).

2. P. Huber, Determination of antineutrino spectra from nuclear reactors, *Phys. Rev. C* 84, 024617 (2011); T. A. Mueller, Improved predictions of reactor antineutrino spectra, *Phys. Rev. C* 83, 054615 (2011).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНЕШНЕГО ВЕТО ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ПРЯМОМУ ПОИСКУ ТЁМНОЙ МАТЕРИИ DARKSIDE-20K

Т.П. Смирнова

НИЦ Курчатовский Институт, Smirnova_TP@nrcki.ru

Эксперимент DarkSide-20k (DS-20k) направлен на прямое обнаружение Тёмной материи в виде слабовзаимодействующих массивных частиц (WIMP). Детектор DS-20k представляет собой двухфазную времяпроекционную камеру (TPC) с активным объемом мишени 50 тонн [1]. В качестве мишени используется жидкий аргон подземного происхождения (UAr). Времяпроекционная камера расположена внутри мембранного криостата, который планируется заполнить 650 тоннами атмосферного аргона (AAr). Этот объём будет использоваться в качестве внешнего вето. Задача внешнего вето состоит в регистрации фоновых событий от космогенных мюонов и связанных с ними ядерно-активных ливней, которые могут активировать изотопы. Поэтому космогенный фон необходимо снижать.

Для оптимизации физических характеристик активной защиты установки DarkSide-20k проведены исследования и поиск оптимальной конструкции с целью максимизации светосбора сцинтилляционного сигнала. Было проведено оптическое моделирование сигналов при прохождении мюонов с помощью пакета g4ds [2], основанного на GEANT4. Моделирование проводилось для разных вариантов количества фотоумножителей и их положения. В результате было установлено, что светосбор установки сильно зависит от выбора вариантов конструкции внешнего вето, в том числе от количества и расположения фотоумножителей и материала отражателя. На основе проведенного моделирования будет выбрана оптимальная конструкция внешнего вето детектора.

Литература.

1. T.N.Thorpe (on behalf of the DarkSide-20k collaboration), The DarkSide-20k TPC and Underground Argon Cryogenic System, DOI:10.48550/ARXIV.2210.00322
2. P.Agnes et al, Simulation of argon response and light detection in the DarkSide-50 dual phase TPC, JINST 12 (2017) P10015, <https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/10/P10015>

ФОТОМЕТРИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ СЕЙФЕРТОВСКОЙ ГАЛАКТИКИ NGC 4151

С.Р.Рагимли, Н.А.Гусейнов

Министерство Науки и Образования Шамахинская Астрофизическая
Обсерватория имени Н. Туси, info@shao.science.az

В данной работе мы представляем оптический мониторинг сейфертовской галактики (СГ) первого типа NGC 4151 [1]. Наблюдение проведено на телескопе «Zeiss 600» ШАО им. Н.Туси. Фотометрические BVRI наблюдение проведено в период 2016-2021 г. Для ответа на вопрос, что находится в ядрах активных галактик, необходимо имеет сведения об особенностях переменности ядер сейфертовских галактик [2].

В астрофизике пока известно, единственный естественный источник энергии, который мог бы длительное время «работать» с обычным веществом в ядре СГ и обеспечивать наблюдаемый уровень мощного энерговыделения, это аккреция вещества в гравитационном поле сверхмассивной черной дыры [3]. Результаты фотометрических наблюдений СГ NGC 4151 показывает что, наблюдается переменность во всех фильтрах. В фильтрах BVRI в 24.07.2016 блеск галактики увеличился и в 06.01.2017 стала ярче 1,104, 0,394, 0,354, 0,514 соответственно. А потом галактика стала ослабеть с 18.05.2018 в фильтрах BVRI ослабла 0,205, 0,116, 0,127 и 0, 167 соответственно. А потом галактика увеличил яркость с 21.05.2020 в фильтрах BVRI стала ярче 0, 466, 0,287, 0,308 и 0,277 соответственно. После этого галактика снова увеличил яркость и в 11.02.2021 и стала ярче 0,449, 0,213, 0,194 и 0,163 в фильтрах BVRI соответственно.

Мы считаем наблюдаемый, переменность связано с изменением темпа аккреций вещества в ядерную область сейфертовской галактики NGC 4151.

Литература.

1. Seyfert, C., *Astrophys. Journal*, 1943, 97, p. 28.
2. Oknyansky, V.L., et al., *MNRAS*, 2017, 467, No 2, p.1496.
3. Засов А. В., Постнов К. А. *Общая астрофизика*. 2006. 496, Москва.

ОБНАРУЖЕНИЕ РАСПАДОВ $B^0_S \rightarrow \psi(2S) K^0_S$ И $B^0 \rightarrow \psi(2S) K^0_S$
 $\pi^+ \pi^-$ НА ЭКСПЕРИМЕНТЕ CMS

Тулупов А.Н.*, Поликарпов С.М.*

atulupov@cern.ch

* Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
Физический институт имени П. Н. Лебедева,

Используя данные протон-протонных столкновений с энергией $\sqrt{s} = 13$ ТэВ, набранные в эксперименте CMS на Большом Адронном Коллайдере (БАК) в 2017 и 2018 годах с интегральной светимостью 103 фб^{-1} , со значимостью свыше пяти стандартных отклонений, были восстановлены распады $B^0 \rightarrow \psi(2S) K^0_S$ и $B^0_S \rightarrow \psi(2S) K^0_S \pi^+ \pi^-$.

Впервые были получены величины отношений относительных вероятностей распадов $\text{Br}(B^0_S \rightarrow \psi(2S) K^0_S) / \text{Br}(B^0 \rightarrow \psi(2S) K^0_S) = (3,33 \pm 0,69 \text{ (стат)} \pm 0,11 \text{ (сист)} \pm 0,34 \text{ (fs/fd)}) \times 10^{-2}$ и $\text{Br}(B^0 \rightarrow \psi(2S) K^0_S \pi^+ \pi^-) / \text{Br}(B^0 \rightarrow \psi(2S) K^0_S) = 0,480 \pm 0,013 \text{ (стат)} \pm 0,032 \text{ (сист)}$, где последняя погрешность в первом отношении связана с неопределенностью отношения сечений рождения B^0_S - и B^0 -мезонов, fs/fd.

Литература.

1. CMS Collaboration et al. Observation of $B^0 \rightarrow \psi(2S) K^0_S \pi^+ \pi^-$ and $B^0_S \rightarrow \psi(2S) K^0_S$ decays // Eur. Phys. J. C 82, 499 (2022).

ПОИСК ЛЕПТОКВАРКОВ, РАСПАДАЮЩИХСЯ НА ТОП КВАРК И
ЛЕПТОН, НА ЧАСТИ ДАННЫХ CMS ПРИ ЭНЕРГИИ В СИСТЕМЕ
ЦЕНТРА ИНЕРЦИИ 13 ТЭВ

А. М. Колов

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
amkolov@yandex.ru

В протон-протонных столкновениях на БАК была изучена возможность поиска лептокварков, распадающихся на топ кварк и лептон, на части данных CMS при $\sqrt{s}=13$ ТэВ.

Были получены верхние пределы на массу лептокварка, а также произведения сечения рождения пары лептокварков на БАК и относительной вероятности распада лептокварка на топ кварк и лептон с уровнем достоверности 95%.

Литература.

1. Lees J. P. et al. Evidence for an excess of $B^- \rightarrow D^* \tau^- \nu^- \tau$ decays //Physical review letters. – 2012. – Т. 109. – №. 10. – С. 101802.
2. Aaij R. et al. Test of lepton universality using $B^+ \rightarrow K^+ \ell^+ \ell^-$ decays //Physical Review Letters. – 2014. – Т. 113. – №. 15. – С. 151601.
3. CMS Collaboration et al. Search for Pair Production of Second-Generation Scalar Leptoquarks in pp Collisions at $\sqrt{s}=7$ TeV //arXiv preprint arXiv:1012.4033. – 2010.
4. Beringer J. et al. Particle data group //Phys. Rev. D. – 2012. – Т. 86. – №. 010001.
5. Sirunyan A. M. et al. Measurements of properties of the Higgs boson decaying into the four-lepton final state in pp collisions at $\sqrt{s}=13$ TeV //Journal of High Energy Physics. – 2017. – Т. 2017. – №. 11. – С. 1-55.
6. CMS collaboration et al. CMS luminosity measurement for the 2017 data-taking period at $\sqrt{s}=13$ TeV //CMS Physics Analysis Summary CMS-PAS-LUM-17-004. – 2018. – С. 90.
7. Borschensky C. et al. Scalar leptoquark pair production at the LHC: precision predictions in the era of flavour anomalies //Journal of High Energy Physics. – 2022. – Т. 2022. – №. 2. – С. 1-37.

РАСЧЁТ ОЖИДАЕМОГО ЭФФЕКТА ОТ ВОЗБУЖДЁННОЙ ТЁМНОЙ МАТЕРИИ В ДЕТЕКТОРАХ ТИПА БОРЕКСИНО

К. К. Киселев¹, Р.Р. Нугманов²

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Кафедра № 40 «Физика элементарных частиц», Москва,
kirya.kiss.2001@mail.ru

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Представлен расчёт энергетического спектра протонов отдачи от неупругого рассеяния частиц тёмной материи в сцинтилляторе детектора типа Борексино.

Также рассчитан эффект от подобных событий. Полученные значения, в зависимости от доли возбуждённых частиц тёмной материи и сечения их взаимодействия с протонами, лежат в пределах $0.5 \div 5000$ событий в год.

Литература.

1. Douglas P. Finkbeiner and Neal Weiner, Exciting dark matter and the INTEGRAL/SPI 511 keV signal, *Phys. Rev. D* 76, 2007
2. G. Alimonti et al., The Borexino detector at the Laboratori Nazionali del Gran Sasso, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2009, volume 600, issue 3, pages 568-593

ПОИСК НОВОГО РАСПАДА ПРЕЛЕСТНОГО БАРИОНА В
ЭКСПЕРИМЕНТЕ CMS

М.А. Сергеев^{*}, С.М. Поликарпов^{*,**}

^{*} Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

^{**} Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

В многочастичных распадах прелестных мезонов и барионов, с участием чармониевого резонанса могут давать вклад экзотического состояния адронов. Коллаборация LHCb на Большом Адронном Коллайдере (БАК) в 2015г. заявила о наблюдении структуры в распаде прелестного бариона, согласующейся с пентакварком [1].

В данном докладе излагается поиск нового распада, в котором возможен вклад пентакварковых состояний нового типа. Работа выполнена с использованием данных эксперимента CMS на БАК, набранных в столкновениях протонов с энергией 13 ТэВ и соответствующих интегральной светимости около 140 фбн⁻¹.

Литература.

1. LHCb Collaboration, Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 072001, doi:10.1103/PhysRevLett.115.072001, arXiv:1507.03414.

СПЕКТР β -ЭЛЕКТРОНОВ В $0\nu 2\beta$ РАСПАДЕ С УЧЕТОМ ВОЗБУЖДЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБОЛОЧКИ АТОМОВ

М.И. Криворученко, К.С. Тырин, Ф.Ф. Карпешин*

НИЦ Курчатовский Институт, Tyrin_KS@nrcki.ru

* Всероссийский Научно-исследовательский институт метрологии имени Д.И. Менделеева

Обсуждается влияние эффекта возбуждения электронной оболочки атомов на энергетические спектры бета-электронов в безнейтринном двойном бета-распаде ($0\nu 2\beta$). Установлено, что в бета-распадах канал с электронной оболочкой дочернего атома в основном состоянии не всегда является доминирующим [1]. Возбуждение и ионизация электронной оболочки (эффекты встряхивания), а также химический сдвиг атомных уровней, приводят к модификации наблюдаемых энергетических спектров. Это обстоятельство следует принимать во внимание в экспериментах по поиску и определению майорановской массы нейтрино, таких как эксперимент LEGEND [2].

Приведены оценки размытия и сдвига пика в энергетическом спектре $0\nu 2\beta$ германия-76 за счет эффектов встряхивания в пределе больших энергий реакций Q . Каналы возбуждения и ионизации электронов атома формируют в энергетическом спектре реакции $0\nu 2\beta$ размытую, протяженную структуру перед пиком, отвечающим основному состоянию дочернего атома. Вычисление средней энергии возбуждения и дисперсии проводились в модели Томаса-Ферми, с использованием метода функционала плотности Томаса-Ферми-Дирака-Вайцзеккера [3] и метода Дирака-Хартри-Фока. Результаты сопоставлены с расчетами, выполненными с помощью программного пакета моделирования многоэлектронных атомных систем GRASP [4].

Расчеты указывают на значительные флуктуации в энергии возбуждения дочернего атома вследствие редких, высокоэнергичных переходов электронов из глубоких атомных уровней на свободные дискретные уровни и в непрерывный спектр.

Литература.

1. M.I. Krivoruchenko, K.S. Tyrin, EPJ A 56, 16 (2020).
2. N. Abgrall et al., AIP Conference Proceedings 1894, 1 (2017).
3. W. Stich et al., Z. Phys. A 309, pp. 5-11 (1982).
4. C. Froese Fischer et al., Comput. Phys. Commun. 237, pp. 184-187 (2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФАЙНМЕНТА В РЕШЕТОЧНОЙ КХД С $N_c=2$ ДЛЯ $\mu_Q \geq 0$

И.Е. Кудров, В.Г. Борняков

Институт физики высоких энергий им. А. А. Логунова НИЦ
Курчатовский Институт, ilyakudrov@yandex.ru

Одно из возможных объяснений конфайнмента цвета в сильных взаимодействиях дает сценарий дуального сверхпроводника [1]. Многочисленные результаты, полученные в решеточной КХД после фиксации максимальной абелевой калибровки указывают на возможность этого сценария конфайнмента. Предполагается, что основной вклад в непертурбативные явления вносится компонентой калибровочного поля, создаваемой цвето-магнитными монополями. Мы исследуем свойства декомпозиции калибровочного поля на монопольную и безмонопольную компоненты. Ранее, для $SU(2)$ [2] и $SU(3)$ [3] глюодинамики мы показали, что монопольная компонента воспроизводит линейную часть статического потенциала, а безмонопольная компонента создает чисто кулоновский потенциал, и их сумма обеспечивает хорошее приближение исходного статического потенциала на всех расстояниях. В данной работе мы исследуем декомпозицию статического потенциала в случае двухцветной решеточной КХД при различных значениях кваркового химического потенциала μ_Q на решетке с $L=32$ [4]. В таблице представлены наши результаты для натяжения струны σ и кулоновского коэффициента α для 2-х значений μ_Q . Полученные результаты показывают, что декомпозиция статического потенциала на монопольную и безмонопольную компоненты выполняется с хорошей точностью при всех значениях $\mu_Q \geq 0$.

$\mu_Q A$	0			
тип	SU2	Мон.+Безмон.	Мон.	Безмон.
σa^2	0.012(1)	0.011(1)	0.011(1)	-
α	-0.31(1)	-0.028(1)	-	-0.29(1)

$\mu_Q A$	0.15			
тип	SU2	Мон.+Безмон.	Мон.	Безмон.
σa^2	0.0082(6)	0.0093(7)	0.0095(4)	-
α	-0.324(7)	-0.295(5)	-	0.281(6)

Литература.

1. G. 't Hooft, in High Energy Physics, ed. A. Zichichi, EPS International Conference, Palermo (1975)
2. V.G. Bornyakov, I. Kudrov, Phys.Rev.D 105 (2022) 5, 054519
3. В.Г. Борняков, И.Е. Кудров, Письма в ЖЭТФ, том 117, вып. 5, с. 332-336
4. V.G. Bornyakov, A. Begun, Phys.Rev.D 105 (2022) 11, 114505

ИЗМЕРЕНИЕ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВА СЕРЫ С ПОМОЩЬЮ ПРОТОННОЙ РАДИОГРАФИИ

Р.О. Гаврилин, А.В. Скобляков, А.О. Хурчиев, А.В. Канцырев, А.А. Голубев, D. Varentsov*, R. Belikov*

НИЦ Курчатовский Институт, roman_gavrilin@mail.ru

*GSI, Дармштадт, Германия

На установке PRIOR II [1] в GSI (Германия) методом протонной радиографии при энергии протонов 2.5 ГэВ и режиме медленного вывода пучка были проведены измерения вязкости расплава серы при давлении 90 бар и температуре в диапазоне от 150 до 350 °С. Для измерения вязкости расплава серы применялся метод Стокса [2]. Рассчитанное значение вязкости серы в сравнении с теоретическими расчетами [3] приведено на рис.1 справа. Максимальная вязкость, измеренная в проведенных экспериментах, составила $\eta_{\max} = (10.2 \pm 0.6)$ Па·с.

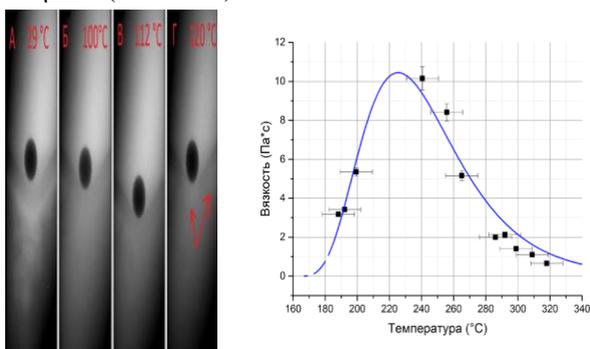


Рис.1 Слева - радиографическое изображение капсулы, заполненной расплавом серы, в которой падает вольфрамовый шарик диаметром 2 мм. Справа – рассчитанное по результатам измерений значение вязкости серы (черные точки) в сравнении с теоретическими расчетами (синяя кривая)

Литература.

1. D. Varentsov, et al., Rev.of Sc.Ins, 2016, 87, issue 2, p. 023303/1–023303/8;
2. Reynold E. Sukara, et al., An International Journal, 32:4, 451-456, 2012.
3. Stashick M.J. et al., AIChE J. 2020; 66:e16225.

РАЗДЕЛЕНИЕ СЛИВШИХСЯ СИГНАЛОВ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ КАЛОРИМЕТРЕ

Фоменко Г.Е.*

НИЦ „Курчатовский Институт“, fomenko.gleb@mail.ru *
Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

В данной работе представлен оптимизированный алгоритм по разделению частично перекрывающихся кластеров от двух гамма-квантов в поперечно-сегментированном электромагнитном калориметре, аналогичном фотонному спектрометру PHOS [1] в эксперименте ALICE. Модель калориметра представляет собой сборку кристаллов вольфрамата свинца ($PbWO_4$) размером 11×11 элементов; размер каждого элемента $22 \times 22 \times 180$ мм³. В пакете GEANT4 [2] было проведено моделирование попадания в калориметр двух фотонов на фиксированном расстоянии между ними в диапазоне энергий фотона от 100 МэВ, до 10 ГэВ. Было изучено влияние на точность восстановления параметров частиц различных методов аппроксимации распределения электромагнитного ливня в калориметре с применением функций Гаусса и функции, представленной в работе [1].

Работа алгоритма была верифицирована с помощью восстановления инвариантной массы π^0 -мезона с энергией до 40 ГэВ. Разработанный алгоритм может найти применение в различных экспериментах в области физики высоких энергий.

Литература.

1. V. I. Man'ko et al. (ALICE), ALICE Photon Spectrometer (PHOS): Technical Design Report. ALICE (CERN, Geneva, 1999).
2. S. Agostinelli

УЧЕТ АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ ДИФРАКЦИОННОГО СПЕКТРОГРАФА ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ИЗЛУЧЕНИЯ ПЛАЗМЫ

Д.С. Колесников, А.В. Скобляков, А.В. Канцырев, А.А. Голубев

НИЦ Курчатовский Институт, dstorm1@mail.ru

Информация о рентгеновском спектре излучения, эмитируемого плазмой импульсных лазерных и электроразрядных установок, необходима для понимания и описания протекающих в плазме физических процессов и построения моделей поведения вещества в экстремальном состоянии. Для регистрации рентгеновских спектров излучения в диапазоне 1÷40 нм применяются спектрографы скользящего падения. Основными проблемами, препятствующими достоверному восстановлению спектров из экспериментальных данных, являются наложение сигналов от разных порядков дифракции и сложный вид аппаратной функции, зависящий от длины волны регистрируемого излучения. Для расчета аппаратной функции спектрографа в среде Geant4 разработана его виртуальная Монте-Карло модель [1], учитывающая геометрию проведения эксперимента, форму профиля штриха, материал и структуру покрытия дифракционной решетки. С использованием рассчитанных модельных спектров проведено исследование параметров аппаратной функции, получено ее аналитическое приближение. Разработана методика [1] позволяющая, с учетом аппаратной функции спектрографа, проводить восстановление спектров рентгеновского излучения. Выполнено восстановление экспериментальных рентгеновских спектров плазмы Z-пинча установки Ангара 5-1 [2] при токе ~2.7 МА, с нагрузками из вольфрамовых проводников.

Работа выполнена при поддержке Договора НИОКР №17706413348210001380/226/3467-Д от «23» июня 2021 г. между АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ» и НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ в рамках комплексной программы "Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации на период до 2024 года"

Литература.

1. А.В. Скобляков, Д.С. Колесников, А.В. Канцырев, А.А. Голубев и др., Физика плазмы, 2023, (в печати).

2. Альбикиов З.А. и др., Атомная энергия, 1990, Т.68, Вып. 1, с. 26-35.

РЕКОНСТРУКЦИЯ АНТИНЕЙТРОНОВ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ КАЛОРИМЕТРЕ PHOS

П.П. Гордеев

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
НИЦ «Курчатовский институт»

В физике высоких энергий антинейтроны практически не исследовались, однако с их помощью можно изучать распады адронов (с антинейтронами в конечном состоянии), взаимодействие антинейтронов с адронами и даже искать связанные состояния антинейтронов [1, 2]. В работе представлен метод измерения антинейтронов с помощью электромагнитного калориметра PHOS эксперимента ALICE [3, 4]. Идентификация антинейтрона производится по форме кластера и выделенной энергии в калориметре, а значение импульса может быть восстановлено по информации о времени пролета. Предложенный метод был проверен с помощью реконструкции анти- Σ^{\pm} гиперонов по каналу распада на заряженный пион и антинейтрон, реконструированный с помощью PHOS.

Литература.

1. M. Duer, T. Aumann, R. Gernh'äuser, V. Panin, S. Paschalis, D. Rossi, N. Achouri, D. Ahn, H. Baba, C. Bertulani, et al., Observation of a correlated free four-neutron system, Nature 606, 678 (2022).
2. D. Nguyen, C. Neuburger, R. Cruz-Torres, A. Schmidt, D. Higinbotham, J. Kahlbow, P. Monaghan, E. Piasetzky, and O. Hen, Search for a bound di-neutron by comparing $3\text{He}(e,e'p)d$ and $3\text{H}(e,e'p)X$ measurements, Physics Letters B 831, 137165 (2022).
3. K. Aamodt et al. (ALICE Collaboration), The ALICE experiment at the CERN LHC, JINST 3, S08002 (2008).
4. ALICE Collaboration, ALICE Photon Spectrometer (PHOS): Technical Design Report, CERN-LHCC-99-004, CERN, Geneva (1999).

ИЗМЕРЕНИЕ СЕЧЕНИЯ РОЖДЕНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГИЧНЫХ НЕЙТРАЛЬНЫХ π -МЕЗОНОВ В PP-СТОЛКНОВЕНИЯХ ПРИ ЭНЕРГИИ 13 ТЭВ

В.А. Кусков*

НИЦ Курчатовский Институт, vakus98@gmail.com

* Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Экспериментально измеряемые спектры нейтральных π -мезонов являются эффективным инструментом для изучения предсказаний Квантовой хромодинамикой (КХД) – теории, описывающей сильное взаимодействие [1].

Эксперимент ALICE [2] предназначен для изучения свойств сильного взаимодействия и фазовой диаграммы КХД. В состав детектора ALICE входит фотонный спектрометр PHOS – электромагнитный калориметр, состоящий из кристаллов $PbWO_4$, обладающий высоким пространственным и энергетическим разрешением [3]. Фотоны в PHOS восстанавливаются по их энерговыделению в материале калориметра в процессе развития электромагнитного ливня. Несколько ячеек калориметра, в которых развивается ливень, объединяются в кластер. При высокой энергии налетающих π^0 -мезонов дочерние фотоны рождаются при узком угле разлета. Попадая в PHOS, такие фотоны образуют единый наложенный кластер с энерговыделением от обоих фотонов. Соответственно, такие кластеры можно использовать напрямую для восстановления родительских π^0 -мезонов. Наложённые кластеры отличаются от кластеров с одним фотоном вытянутой формой, характеризующейся параметром M_{02} . В данной работе разработан метод по отбору наложенных кластеров на основе параметра M_{02} . Сечение рождения инклюзивных π^0 -мезонов в pp-столкновениях при $\sqrt{s} = 13$ ТэВ, измеренное с использованием предлагаемого метода в комбинации с используемыми ранее методами [4], согласуется с расчетами КХД в широком диапазоне поперечных импульсов от 0,4 ГэВ/c до 200 ГэВ/c.

Литература.

1. Gross D. J., Wilczek F., Phys. Rev. D 8, 3633 (1973).
2. Abelev V. et al, Int. J. Mod. Phys. A 29, 1430044 (2014).
3. Blau D., J. Phys.: Conf. Ser. 1690, 012044 (2020).
4. Acharya S. et al, Phys. Lett. B 827, 136943 (2022).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ КОСМОФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В.В. Михайлов, П. Мухин*

* Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ",
pasha_myxin@mail.ru

Эксперимент PAMELA в течение 10 лет проводил измерения потоков космическим лучей [1], в том числе потоков электронов и позитронов [2–4]. Особый интерес представляет собой исследование потоков электронов и позитронов низких энергий в свете поиска возможных экзотических локальных источников космических лучей среди которых первичные черные дыры [5], темная материя [6], и излучения солнечной модуляции [7,8].

Для повышения эффективности отбора электронных и позитронных событий в данной работе применяются методы машинного обучения [9]. С помощью такой методики получены предварительные результаты по потокам электронов и позитронов с 2006 по 2015 гг. для энергий от ~100 МэВ до 1 ГэВ. По этим данным рассматриваются наблюдаемые особенности в потоках, связанные с зависимостью солнечной модуляции от знака заряда.

Литература.

1. O. Adriani, et al., Rivista del Nuovo Cimento, 2017, 40(10), p. 473–522.
2. O. Adriani, et al., Phys. Rev. Lett., 2011, 106, 201101.
3. O. Adriani, et al., Phys. Rev. Lett., 2013, 111, 081102.
4. O. Adriani, et al., Phys. Rev. Lett., 2016, 116, 241105.
5. M. Boudaud, M. Cirelli, Phys. Rev. Lett., 2019, 122, 041104.
6. M. Aguilar, et al., Phys. Rev. Lett., 2019, 122, 041102.
7. D. Bischoff, M.S. Potgieter, O.P.M. Aslam, Astrophys. J., 2019, 878(1), 59.
8. В.В. Михайлов, С.А. Воронов, Изв. РАН. Сер. Физ., 2021, 85(9), с. 1344–1346.
9. https://root.cern.ch/doc/master/classTMVA_1_1MethodBDT.html

ПРИМЕНЕНИЕ НОВЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ КАЛОРИМЕТРИИ В ФИЗИКЕ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Д. А. Аверьянов, Д. С. Блау

НИЦ «Курчатовский Институт», daver99@yandex.ru

Гомогенные калориметры на основе сцинтилляционных монокристаллов широко используются в физике высоких энергий благодаря их хорошему энергетическому, пространственному и временному разрешениям. Примером использования таких кристаллов (PbWO_4/PWO) является высокогранулярный фотонный спектрометр PHOS [1] в эксперименте ALICE [2] на Большом адронном коллайдере. При использовании кристаллов PWO измерения в области низких p_T невозможны из-за относительно низкого световыхода этих кристаллов. Для точного измерения энергии мягких фотонов можно использовать кристаллы с высоким световыходом, например, новый перспективный материал $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}$ (GAGG).

С помощью радиоактивных источников ^{22}Na и ^{137}Cs нами были получены энергетические спектры поглощения в кристаллах GAGG разной длины (0.5, 1.5 и 3 см). Из параметризации энергетического разрешения можно оценить световыход, среднее значение которого составило 420 ± 16 ф.э./МэВ. С помощью пакета Geant4 [3] было проведено моделирование электромагнитного калориметра на основе сцинтилляционных кристаллов PWO, GAGG и составного варианта GAGG + PWO. Показано, что составной калориметр ($L_{\text{GAGG}} = 10$ см) имеет почти такое же энергетическое разрешение, как GAGG при малых энергиях ($\sim 2\%$ при $E = 1$ МэВ), и несколько лучшее, чем PWO при больших энергиях ($\sim 0.5\%$ при $E = 1$ ГэВ). Пространственное разрешение во всех трех случаях практически не меняется.

Также показано возможное применение калориметра на основе кристаллов GAGG для обнаружения скрытых веществ с помощью метода меченых нейтронов [4]. Подобный калориметр позволяет с хорошей точностью разрешать такие элементы, как O, C, N и другие.

Литература.

1. G. Dellacasa et al. (ALICE Collab.), CERN-LHCC-99-04 (1999).
2. ALICE Collab., J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 32, 1295 (2006).

3. Geant4 Collab., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., Sect. A 506, 250 (2003).
4. L. I. Ussery et al., Report LA12847MS (Los Alamos, 1994).

ФЛУКТУАЦИЯ ЧИСЛА НЕЙТРАЛЬНЫХ ПИОНОВ В РРВ СТОЛКНОВЕНИЯХ ПРИ ЭНЕРГИИ $\sqrt{S} = 5.02$ ТэВ

Е.А. Некрасова

НИЦ Курчатowskiй Институт, nekrasowa.ewgenia@gmail.com

Флуктуации числа частиц в столкновениях при высоких энергиях могут быть использованы как инструмент для обнаружения новой физики, в частности резкое увеличение амплитуды флуктуаций может служить сигналом образования дезориентированного кирального конденсата [1], Бозе-Эйнштейновского конденсата пионов [2] или прохождения системы близко к критической точке КХД [3]. В работе представлены результаты моделирования методом Монте-Карло флуктуаций нейтральных и заряженных пионов в зависимости от центральности в столкновениях протон-свинец при энергии $\sqrt{S} = 5.02$ ТэВ. Оценка величины флуктуаций производилась с помощью переменной v_{dnp} [4].

Также была рассмотрена возможность восстановления величины флуктуации нейтральных пионов по величине флуктуаций фотонов в условиях детектора с конечным акцептансом и связанные с этим сложности.

Литература.

1. Pisarski, S. Gavin, S. Voloshin, Phys. Rev. D., 1984, p. 338-341
2. Begun, Gorenstein, Phys. Lett. B., 2007, p. 190-195
3. Luo, Xiaofeng, Xu, Nucl. Sci. Tech., 2017, p. 112
4. C. Pruneau, S. Gavin, S. Voloshin, Phys. Rev. C., 2002, V 66.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКЛИКА МНОГОСЛОЙНОГО СЦИНТИЛЛЯЦИОННОГО ГОДОСКОПА ДЛЯ ПУЧКА ПРОТОНОВ

Ш.О. Баходиров

НИЯУ "МИФИ", bshohrux79@gmail.com

Цель данного исследования - моделирование отклика многослойного сцинтилляционного годоскопа, состоящий из нескольких взаимно перпендикулярных слоев сцинтиллятора и матриц кремниевых фотоумножителей (SiPM), на пучок протонов с помощью Geant4 [1]. Были проведены расчеты координатного и углового разрешений годоскопа на основе моделирования отклика на пучок протонов. На рисунке справа показан расчет события для одного протона с энергией 10 ГэВ.

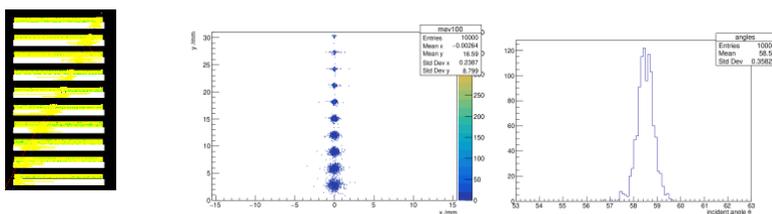


Рис.1. 1) Проекция трека на плоскость годоскопа

2) Распределение расчетного угла.

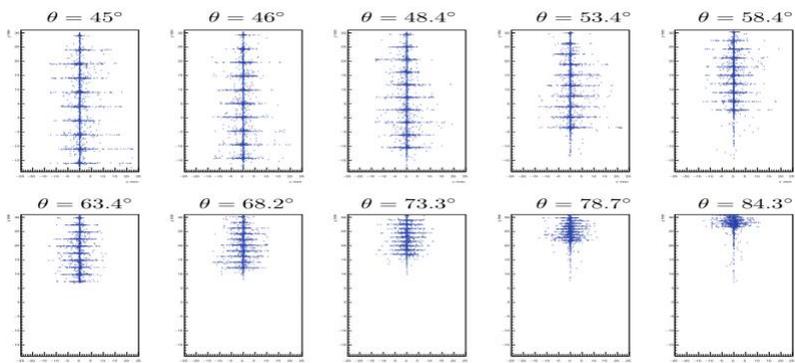


Рис.2. Проекция трека на плоскость годоскопа при различных углах падения ($E_p=10$ GeV).

Угловое разрешение составляет $1-2^\circ$ в зависимости от энергии и угла падения протонов.

Литература.

1. S. Agostinelli, "Geant4-a simulation toolkit" NIMPR, vol. 506, no. 3, pp. 250–303, 2003.

МАССИВ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ДЕТЕКТОРОВ GADAST ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАКЦИЙ ПРОТОННОЙ РАДИОАКТИВНОСТИ

Б.Р. Хамидуллин^{1*}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра ядерно-физического материаловедения, khamidullinbr@jinr.ru

*Объединённый институт ядерных исследований, Лаборатория ядерных реакций

Сцинтилляционные детекторы на основе CsI(Tl) является широко используемым инструментом в ядерной физике, особенно в области спектрометрии гамма-излучения. Большие кристаллы CsI(Tl), подобные нашим, используются во многих коллаборациях [1,2].

Массив детекторов GADAST представляет собой набор из 128 сцинтилляторов CsI(Tl) и 32 LaBr₃, и предназначен для детектирования гамма-излучения, образующегося при девозбуждении тяжелых фрагментов вторичного пучка, создаваемых в процессах двухпротонной радиоактивности. Двухпротонные распады представляют большой интерес, поскольку механизмы их образования и многие изотопы, обнаруживающие данное явление, плохо изучены. Примером эксперимента с использованием GADAST является исследование свойств экзотического изотопа углерода-7 и изучение его протонной радиоактивности.

В данной работе исследовались свойства детекторов на основе CsI(Tl). Проведены измерения энергетического разрешения и неоднородности световых выходов. С помощью пакета ExpertRoot [3,4], использующего методы Монте-Карло для симуляции взаимодействия частиц, было проведено моделирование экспериментальной установки, для исследования влияния различных параметров на конечный спектр.

Реализован оригинальный алгоритм моделирования наложенных сигналов, которые наблюдались из-за высокой интенсивности источников. Алгоритм наложения импульсов будет использован в дальнейшем, когда GADAST будет располагаться в районе ионного пучка с высокой интенсивностью. Также моделируется неоднородность

световыхода, поскольку её учёт может быть необходим при работе с кристаллами большого размера, подобных детекторам системы GADAST.

Литература

1. A. Knyazev et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, 2019, p. 393-404
2. G. Li et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, 2021, 165637
3. <https://edms.cern.ch/document/1865700/2>, Technical Report for the Design, Construction and Commissioning of the setup EXPERT: Exotic Particle Emission and Radioactivity by Tracking
4. <http://er.jinr.ru/>, ExpertRoot documentation

АНАЛИЗ ПОСОБЫТИЙНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ПАРТОНОМ ПРИ МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИИ СТОЛКНОВЕНИЙ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ

Ю.А. Русак*

*Государственное научное учреждение «Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны» НАН Беларуси

В данной статье показано, что распределение множественностей заряженных адронов по быстрой может отразить информацию об образованной среде (горячей/холодной) в тяжелоионных столкновениях. Для этого, в Монте-Карло генератор HIJING были имплементированы различные модели потери энергии партоном при прохождении через образовавшуюся среду. Также, в рамках модифицированного Монте-Карло генератора HIJING были проанализированы флуктуации результирующих электрического, барионного зарядов, странности и множественности заряженных адронов. Было проведено сравнение с результатами эксперимента STAR. Сравнение показало, что измеренные флуктуации результирующих барионного и электрического зарядов воспроизводятся всеми моделями. Флуктуации множественности заряженных частиц и странности могут дать информацию об образованной, но экспериментально измерены не были.

Секция 8.
Перспективные энергетические
технологии

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ В СОСТАВЕ МЕМБРАННО-ЭЛЕКТРОДНОГО БЛОКА ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА

Козлова М.В.*, Бутрим С.И.* , Соловьев М.А.* , Симкин Д.А.,
Пушкарева И.В.** , Пушкарев А.С.** , Фатеев В.Н.

НИЦ «Курчатовский Институт», kozlova_mv@nrcki.ru
* Национальный исследовательский университет "МЭИ"
** Центр водородной инфраструктуры,
Северо-западный университет
Потchefструм

Топливные элементы являются важной составной частью водородной энергетики, которая является одной из наиболее экологически чистых отраслей энергетики. В частности, при производстве электроэнергии с помощью топливных элементов с твердым полимерным электролитом (ТЭ с ТПЭ) в окружающую среду в качестве побочного продукта выделяется лишь вода.

Как правило, в качестве носителей электрокатализаторов ТЭ с ТПЭ чаще всего используют сажи, но они имеют существенные недостатки, такие как наличие примесей, высокая доля микропор и недостаточная электрохимическая стабильность. Поэтому углеродные материалы, такие как графеноподобные материалы, рассматриваются в качестве носителей электрокатализаторов.

Модифицирование носителей гетероатомами, например, атомами азота, может способствовать более равномерному распределению наночастиц платины на поверхности модифицированных носителей, а также повышению активности в реакции восстановления кислорода и стабильности электрокатализатора [1].

В настоящей работе были рассмотрены электрокатализаторы на основе модифицированных углеродных материалов, а также их применение в составе мембранно-электродного блока ТЭ с ТПЭ.

Работы выполнены в НИЦ «Курчатовский институт» в рамках выполнения приказа №89 от 20.01.2023 по пункту 3п.2.5. «Разработка новых электрокаталитических материалов с улучшенными свойствами для электрохимических устройств с ТПЭ»

Литература.

A. S. Pushkarev, et al., *Appl. Surf. Sci.*, 2022, p. 529–561.

РАСЧЕТЫ ГАЗОВЫХ НАГРУЗОК НА КОМПОНЕНТЫ ИНЖЕКЦИОННОГО ТРАКТА СИСТЕМЫ НАГРЕВА ПЛАЗМЫ ПУЧКАМИ БЫСТРЫХ АТОМОВ ДЛЯ ПРОЕКТОВ ГИБРИДНОЙ РЕАКТОРНОЙ УСТАНОВКИ НА БАЗЕ ТОКАМАКА

А.Д. Лапин 1, С.С. Ананьев 2

1 «Национальный исследовательский университет «МЭИ» ,
lapinad2000@gmail.com
2 НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

При проектировании перспективных термоядерных установок одним из ключевых параметров, оказывающих существенное влияние на выбор геометрии инжектора пучков, являются потоки газа в вакуумной камере, что обуславливает необходимость расчета распределения плотности газа на разных элементах его конструкции[1]. Целью работы является моделирование профилей плотности газа по длине инжекционного тракта пучков в токамаках проектов ТИН-СТ и ДЕМО-ТИН. Для моделирования был использован код MCGF (MonteCarloGasFlow)[1].

На основании результатов концептуального проектирования систем пучковой инжекции [1] и [2] были рассчитаны профили плотности газа для различных конфигураций инжекторов, которые сравниваются между собой и с опубликованными ранее [1]. В результате проведенного анализа была определена зависимость плотности газа от параметров крио-откачки – что должно обеспечить работоспособность предложенных вариантов компоновки инжекторов для установок ТИН-СТ и ДЕМО-ТИН.

Литература.

1. S.S. Ananyev , E.D. Dlougach , A.I. Krylov , A.A. Panasenkov , B.V. Kuteev, Modeling and optimization of the neutral beam line for plasma heating and current drive for the DEMO-FNS fusion neutron source project, Fusion Engineering and Design 161 (2020).
2. A.A. Panasenkov, S.S. Ananyev, E.D. Dlougach, B.V. Kuteev, Analysis of the setup and parameters of the FNS-ST tokamak fast atom injector, ВАНТ.Сер. Термоядерный синтез, 2021, т. 44, вып. 2, с. 86-99, DOI: 10.21517/0202-3822-2021-44-2-86-99

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛЕГКИХ ИОНОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Л.Г. Лобанова

Национальный Исследовательский Университет «МЭИ»,
lida.lobanova.2017@mail.ru

Знание процессов взаимодействия легких ионов с твердым телом необходимо для определения скорости эрозии поверхности «первой стенки» установок УТС, для реализации таких методов анализа поверхности, как Ion Scattering Spectroscopy, Low Energy Ion Spectroscopy, Medium Energy Ion Spectroscopy, Rutherford Back Scattering.

В настоящей работе предложена аналитическая теория, описывающая взаимодействие легких ионов с твердым телом в широком интервале энергии (от десятков эВ до сотен кэВ) и для любой геометрии рассеяния. Теория основана на решении граничных задач для уравнения переноса методом инвариантного погружения в малоугловом приближении. Гипотеза Ферми, согласно которой рассеяние частиц можно рассматривать как рассеяние по двум независимым каналам – упругое и неупругое, позволяет отдельно решать задачу для уравнения упругого и неупругого переноса. В настоящей работе решение граничной задачи для уравнения упругого переноса получено методом ОКГ, успешно применяемым в задачах электронного рассеяния [1]. Неупругие потери энергии легких ионов описываются в приближении Фоккера-Планка [2]. Предложенная аналитическая теория позволяет описать дифференциальные и интегральные характеристики рассеяния легких ионов в твердом теле, такие как, энергетические и угловые распределения, коэффициенты отражения частиц и энергии.

Исследование проведено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания № FSWF-2023-0016.

Литература.

1. V.P. Afanas'ev, et al., J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom., 2016, p. 16-29.
2. Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах М., Атомиздат, 1980, с. 272.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ПЛЕНОК

Я.С. Молочаев, А.В. Голубева

НИЦ «Курчатовский Институт», MolochaevYaroslav@vk.com

Для облицовки камеры токамака Т-15МД используется графит R6510P100D01. В настоящий момент в токамаке Т-15МД графит установлен двумя поясами внутри камеры. Дополнительно в камере токамака установлены держатели с кремниевыми образцами, которые выступают в роли подложек для сбора продуктов эрозии и переосаждения графита. После окончания экспериментальной кампании необходимо провести исследование структуры и состава ожидаемых углеводородных плёнок. В докладе рассмотрены методы анализа, которые могут быть использованы для этой цели, включая:

1. Анализ методом ядерных реакций (Nuclear Reaction Analysis (NRA), Elastic Recoil Detection Analysis (ERDA))
2. Высокоразрешающая электронная микроскопия (Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ), Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия(XPS), Рамановская спектроскопия, Атомно-силовая спектроскопия)
3. Термодесорбционная масс-спектроскопия (ТДС)
4. Энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия
5. Рентгенофлуоресцентный анализ.

КОНЦЕПТУАЛЬНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ОТКАЧКИ И ИНЖЕКЦИИ ГАЗА ДЛЯ ГИБРИДНОЙ РЕАКТОРНОЙ УСТАНОВКИ НА БАЗЕ ТОКАМАКА

Н.А. Остальцов 1, С.С. Ананьев 2
1 МГТУ им. Н.Э. Баумана
2 НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

nikolai_06.ru@mail.ru

Гибридная реакторная установка (ГРУ) на базе токамака [1], проектирование которой должно быть выполнено к 2035 году в рамках Федерального проекта ФП-3 “Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий” [2, 3] комплексной программы ГК Росатом “Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации на период до 2030 года”, должна продемонстрировать возможность использования быстрых нейтронов, получаемых в реакции синтеза для решения ряда ключевых задач атомной энергетики: наработки топлива, пережигания долгоживущих продуктов деления, испытания материалов и др. [4, 5].

Одной из систем, необходимых для обеспечения стационарной работы токамака, является система вакуумной откачки вакуумной камеры. Система вакуумной откачки предназначена для получения вакуума для формирования плазмы, а также удаления из вакуумной камеры частиц топлива, которые не ступают в реакцию синтеза [6]. Для формирования рабочих условий в диверторе установки и компенсации газовыделения со стенок камеры [7] используется масштабный газонапуск.

На данном этапе проектирования установки ДЕМО-ТИН предложена система откачки с учетом требования симметричной (из двух диверторов - верхнего и нижнего) откачки камеры в рабочем режиме [8]. При этом в проект закладывается возможность откачки всего газового потока только через один дивертор в случае нарушения симметрии [9]. В настоящее время обсуждаются технологические решения, т.к. проект находится на этапе эскизного проектирования.

Принципиальной особенностью систем вакуумной откачки является работа со значительными количествами трития. Очевидно, что утечка трития через вакуумные насосы, патрубки и трубы в атмосферу недопустимы. На сегодняшний день промышленностью РФ не производятся насосные агрегаты для работы в среде трития. Для

реализации проекта потребуется доработка стандартных откачных средств, для возможности безопасной работы с тритием [8, 10].

Существует ряд задач моделирования нестационарных режимов откачки вакуумной камеры, в том числе, с компенсацией газовыделения со стенок. Для их решения должны быть созданы математические модели, включающие ряд элементов топливного цикла токамака [11] – вакуумную камеру, системы инъекции и откачки газа. Поскольку проект ГРУ подразумевает размещение внутри вакуумного объема большого количества элементов, включая первую стенку, диверторы, модули бланкета и другое, важную роль для учета баланса трития в установке является моделирование газовых потоков и распределения давления внутри вакуумной камеры в нестационарных режимах.

На основании существующей электронной cad-модели вакуумной камеры установки, созданной на этапе концептуального проектирования ДЕМО-ТИН, возможно создание замкнутой модели газонапуска и откачки вакуумной камеры с применением турбомолекулярных или криоконденсационных насосов. Рассмотренные в данной работе программные решения позволят производить моделирование газовых потоков в описываемых системах токамака для нестационарных сценариев.

В докладе предлагается подход к моделированию систем откачки и газонапуска для расчета газовых потоков и градиентов давления с использованием пакета моделирования.

Работа выполнена при частичной поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

Список литературы

1. Э.А. Азизов, Е.П. Велихов, Долгий путь к гибриду, *Природа*, №12 (1180), декабрь 2013, с. 8-16, www.ras.ru/publishing/nature.aspx
2. Паспорт федерального проекта Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий, <https://www.innov-rosatom.ru/>
3. В.И. Ильгисонис, К.И. Ильин, С.Г. Новиков, Ю.А. Оленин, О программе российских исследований в области управляемого термоядерного синтеза и плазменных технологий, *Физика плазмы*, 2021, том 47, № 11, с. 963–969., doi: 10.31857/S0367292121110172

ЛОВУШКИ ВОДОРОДА В ВОЛЬФРАМЕ: ОБЗОР

А.П. Персианова, А.В. Голубева

НИИ Курчатовский Институт, Persianova_AP@nrcki.ru

Вольфрам – перспективный материал для защиты первой стенки и дивертора в термоядерных установках [1]. Во время эксплуатации он будет подвергаться воздействию нейтронного и плазменного облучения, а также интенсивных тепловых потоков. В объем материала будут проникать тяжёлые изотопы водорода – дейтерий и тритий, которые в вольфраме могут быть либо в растворённом состоянии, либо захваченными в ловушки. Для обеспечения радиационной безопасности крайне важно предсказывать захват радиоактивного трития в материал термоядерной установки. Для прогнозирования захвата изотопов водорода в вольфрам в масштабах термоядерного реактора применяется численное моделирование, в котором важнейшими параметрами являются энергия связи водорода с ловушками и концентрации ловушек разных типов [2]. По этим параметрам за многие годы было накоплено большое количество не вполне однозначных данных, полученных в ходе лабораторных экспериментальных исследований. В связи с этим возникает необходимость выделить наиболее качественные и содержательные публикации, посвящённые этому вопросу.

Целью работы является обобщение и систематизация доступной информации по ловушкам водорода в вольфраме.

В ходе работы были рассмотрены экспериментальные способы исследования ловушек, применяемые для описания захвата водорода математические модели, существующие программные коды, методы определения энергии связи по термодесорбционным спектрам, проведена систематизация достоверных значений энергии связи водорода с ловушками.

Литература.

1. V. Philipps, J. Nucl. Mater. 415, 1 (2011), p. 2-9.
2. R.A. Causey, T.J. Venhaus, Phys. Scr. 2001, 9 (2001).

ПОДХОД К ЧИСЛЕННОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ТРАНСПОРТА ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА ВО ВНУТРИКАМЕРНЫХ КОМПОНЕНТАХ ГИБРИДНОЙ РЕАКТОРНОЙ УСТАНОВКИ НА БАЗЕ ТОКАМАКА

Д.В. Репин 1, С.С. Ананьев 2

1 МГТУ им. Н.Э. Баумана
2 НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

repindaniil2000@gmail.com

Гибридная реакторная установка (ГРУ) на базе токамака [1], проектирование которой должно быть выполнено к 2035 году в рамках Федерального проекта ФП-3 “Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий” [2, 3] комплексной программы ГК Росатом “Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации на период до 2030 года”, должна продемонстрировать возможность использования быстрых нейтронов, получаемых в реакции синтеза для решения ряда ключевых задач атомной энергетики: наработки топлива, пережигания долгоживущих продуктов деления, испытания материалов и др. [4, 5].

Одним из компонентов топлива для существующих (TFTR, JET) и проектируемых (ИТЭР, ДЕМО, ГРУ и др.) термоядерных установок, реализующих реакцию термоядерного синтеза, является тяжелый изотоп водорода тритий [6]. Его использование позволяет получать наибольшее эффективное сечение реакции синтеза при минимальных энергозатратах. В результате реакции синтеза рождаются быстрые нейтроны, повреждающие конструкционные материалы установки и приводящие к их наведенной активности [*]. С учетом того, что тритий - радиоактивный изотоп, важным обстоятельством работы термоядерной установки является взаимодействие компонентов топлива (в первую очередь, трития) с компонентами установки (в том числе, с учетом дефектов кристаллической структуры материалов, формируемых потоком нейтронов).

Высокая проникающая способность изотопов водорода может привести к существенным потерям трития в теплоноситель, а также накоплению значительного его количества в материалах установки, что накладывает ограничения в связи с радиационной безопасностью

[7]. Для проектирования ГРУ и обеспечения её безопасной эксплуатации необходимо заранее оценить количество изотопов водорода, которое может быть потеряно или удержано в элементах её конструкции, и разработать меры по снижению этого количества.

На данный момент наиболее эффективными методами по изучению транспорта изотопов водорода являются эксперимент и численное моделирование. Для обеспечения предсказательной способности методов численного моделирования они верифицируются путем сопоставления с результатами экспериментов. Существуют хорошо себя зарекомендовавшие и проверенные на большом количестве задач коды: TMAP, TESSIM-X и т.д. [8, 9], однако и они не идеальны, так как основаны на моделях, имеющих различные приближения. В связи с этим продолжают разрабатываться численные модели диффузии и учёта влияния ловушек [10]. На основании опубликованных данных был проведен анализ существующих подходов к численному моделированию транспорта изотопов водорода, в первую очередь, с учетом ловушек для атомов водорода. Это позволяет выбрать наилучший подход и провести моделирование транспорта водорода в ключевых элементах конструкции ГРУ с учетом характерных условий их эксплуатации.

Работа выполнена при частичной поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

Список литературы

[1] Э.А. Азизов, Е.П. Велихов, Долгий путь к гибриду, *Природа*, №12 (1180), декабрь 2013, с. 8-16, www.ras.ru/publishing/nature.aspx

[2] Паспорт федерального проекта Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий, <https://www.innov-rosatom.ru/>

[3] В.И. Ильгисонис, К.И. Ильин, С.Г. Новиков, Ю.А. Оленин, О программе российских исследований в области управляемого термоядерного синтеза и плазменных технологий, *Физика плазмы*, 2021, том 47, № 11, с. 963–969., doi: 10.31857/S0367292121110172

[4] Я.И. Штромбах, А.Ю. Гагаринский, Перспективы ядерной энергетики, *Природа*, №12 (1180), декабрь 2013, с. 17-24, www.ras.ru/publishing/nature.aspx

[5] Kuteev B.V., Goncharov P.R. Fusion-fission Hybrid Systems: Yesterday, Today, and Tomorrow, *Fusion Sci.Technol.* 2020. V. 76. Pp. 836—847, doi: <https://doi.org/10.1080/15361055.2020.1817701>

ИССЛЕДОВАНИЕ КРАЕВЫХ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ МОД МЕТОДОМ ДОППЛЕРОВСКОГО ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ НА СФЕРИЧЕСКОМ ТОКАМАКЕ ГЛОБУС-М2

А.Ю. Токарев, А.Ю. Яшин, К.А. Кукушкин, Г.С. Курскиев*, В.Б.
Минаев*, А.В. Петров, Ю.В. Петров*, А.М Пономаренко, Н.В.
Сахаров*

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
tokarev.ayu@edu.spbstu.ru

*Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе

Основной режим работы действующих и проектируемых токамаков – Н-мода, характеризуется большим градиентом давления на периферии, что обеспечивает подавление турбулентности и улучшение удержания. Однако в области повышенного градиента возникают краевые локализованные моды (ELM), приводящие к импульсным выбросам частиц и энергии на стенки камеры и пластины дивертора [1]. По этой причине исследование ELM является важной задачей, для решения которой необходимо использовать совокупность диагностик, позволяющих определять различные параметры плазмы в различных областях токамака. Наиболее сложной для исследования является внутренняя область, измерения в которой возможны только бесконтактными методами. Один из таких методов – доплеровское обратное рассеяние (ДОР) позволяет по рассеянию электромагнитного излучения на флуктуациях плотности определять их параметры.

В данном докладе представлены результаты использования ДОР для исследования ELM на сферическом токамаке Глобус-М2 [2]. Показано, что амплитуда флуктуаций концентрации и их скорость сильно меняются во время ELM. Использование многочастотного зондирования ДОР позволило определить свойства этих флуктуаций на разных радиусах. Был определен профиль скорости вращения плазмы в разные фазы ELM и во времена между ними. Показано, что ELM сильно влияет на скорость вращения плазмы. Также скорость радиального распространения и локализация ELM измерены с помощью радиального корреляционного ДОР. Кроме того, параметры нитевидных структур или филаментов, возникающих во время ELM, также определены методом ДОР.

Литература.

1. A.W. Leonard 2014 Physics of Plasmas 21 090501

2. Yu.V. Petrov et al 2022 Nucl. Fusion 62 042009

АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ ОДНОПРОХОДНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ЭМ ИЗЛУЧЕНИЯ НА НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ РАЗРЯДА В ТОКАМАКАХ-РЕАКТОРАХ

Д.Р. Филипенко, П.В. Минашин*, А.Б. Кукушкин*

НИЯУ «МИФИ», fdr2001@mail.ru

*НИЦ «Курчатовский институт»

Из-за технологических особенностей омического пробой рабочего газа в токамаках-реакторах, включая ИТЭР, будет возможен только в узком диапазоне значений начального давления рабочего газа и конфигураций магнитного поля. Это обусловлено тем, что из-за больших геометрических размеров установки и большой толщины сверхпроводящих стенок вакуумной камеры, значение ускоряющего тороидального электрического поля на начальной стадии разряда будет ограничено низким значением по сравнению с таковыми для действующих токамаков (в ИТЭР 0.3 В/м, типичные значения ~ 1 В/м) и будет недостаточным для надежного получения плазмы. Поэтому на начальной стадии разряда в ИТЭР для формирования плазмы планируется использовать электронно-циклотронный (ЭЦ) нагрев (EC-assisted start-up) [1], [2].

В настоящей работе проведено сравнение моделей однопроходного поглощения ЭМ излучения на начальной стадии разряда, основанных на работах [3], [4], [5], [6]. Проведенное сравнение необходимо для верификации блока однопроходного поглощения в разрабатываемом методе [7], [8] моделирования эволюции пространственных распределений основных параметров плазмы на начальной стадии нарастания тока разряда в ИТЭР с учетом многопроходного поглощения инжектируемого ЭЦ-излучения.

Литература.

1. Stober J., Jackson G.L., et al., Nuclear Fusion, 2011, 51, 083031.
2. de Vries P.C., Gribov Y., Nuclear Fusion, 2019, 59, 096043.
3. Bornatici M., Cano R., et al., Nuclear Fusion, 1983, 23, 1153.
4. Khayrutdinov R.R., Kuyanov A.Y., et al., Proc. 38th EPS Conference on Plasma Physics, Strasbourg, France, 2011, ECA, 35G, P2.085.

5. Eldridge O.C., Namkung W., et al., Report ORNL/TM-6052, 1977.
6. Bae Y.S., England A.C., Journ. of the Korean Phys. Soc., 2007, 51, 1313-1319.
7. Минашин П.В., Кукушкин А.Б. и др., ВАНТ. Серия: Термоядерный синтез, 2013, 36, 76-84.
8. Minashin P.V., Kukushkin A.B., et al., EPJ Web of Conferences, 2015, 87, 03005.

ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН КАК МЕТОД ДЕТРИТИЗАЦИИ МАТЕРИАЛОВ В ТЕРМОЯДЕРНЫХ РЕАКТОРАХ – ОБЗОР

Т.А. Шишкова 1, 2, А.В. Голубева¹, М.Б. Розенкевич 2

1 НИЦ Курчатовский Институт, anfimova_t_a@mail.ru

2 Российский химико-технологический университет
им. Д. И. Менделеева

Одним из важных вопросов в развитии термоядерной и гибридной энергетик является взаимодействие топливных изотопов водорода – дейтерия и трития – с реакторными материалами.

Поскольку накопление радиоактивного трития в реакторных материалах представляет потенциальную опасность для персонала и населения, а также выводит из полезного оборота дорогостоящий топливный компонент, существует необходимость в разработке технологий и систем извлечения трития из обращенных к плазме и конструкционных материалов. Для выбора определенного метода или комбинации методов определяющими являются такие факторы как тип материала, размер и форма детритизируемого элемента, химическая форма трития в материале, уровень содержания трития на поверхности и в объеме материала, а также цель детритизации. С целью обеспечения безопасной и эффективной работы термоядерной установки в процессе её эксплуатации рассматриваются неразрушающие (in-situ) методы извлечения трития из материалов, среди которых прогрев в вакууме был выбран для строящегося реактора ИТЭР в качестве основного метода детритизации [1]. Альтернативой этому способу детритизации является метод изотопного обмена, основанный на замещении трития в материале более легким изотопом – дейтерием.

Данный доклад посвящен оценке перспективности метода изотопного обмена с точки зрения применения в термоядерных установках и включает систематизацию и обобщение доступных результатов исследований изотопного обмена как способа извлечения тяжелых изотопов из материалов ТЯР.

Работа поддержана НИЦ «Курчатовский институт».

Литература.

1. G. De Temmerman, et al., Nucl. Mater. Energy, 2017, p. 267-272.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЯВЛЕНИЙ В ВЫСОКОЧАСТОТНОМ И СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОМ ПЛАЗМЕННЫХ РАЗРЯДАХ НА УСТАНОВКЕ ПС-1

Янченков С.В., Денисов А.С., Жильцов В.А.

1 НИЦ «Курчатовский институт»

sasa.qwe.123123@gmail.com

Ключевые слова: безэлектродный плазменный ракетный двигатель, геликонный источник плазмы, ионный циклотронный резонанс, магнитное сопло.

Стенд ПС-1 предназначен для проверки физических принципов, положенных в основу концепции БПРД. Цель экспериментов на стенде ПС-1 – исследование механизмов ввода ВЧ и СВЧ мощности в плазму.

В задачи исследований входят: получение плазмы и исследование её параметров,

анализ массовых и энергетических спектров плазменных пучков в магнитном сопле, исследование возникновения и распространения потенциалов плазме, отработка методики, а также инженерных и технологических решений по регистрации, обработке и анализу диагностических данных.

В рамках экспериментальной работы исследованы азимутальные, радиальные и продольные профили таких параметров как: электронная плотность, электронная и ионная температуры, потенциал и плотность тока плазмы. Были созданы системы, совершенствующие процесс исследования эффективности ввода ВЧ и СВЧ мощности в плазму, измерения необходимых показателей во время импульса, а также процесс обработки полученных данных.

Исследования выявили большую предрасположенность системы к возникновению и распространению колебаний плазмы, что является эффективным каналом поглощения и транспорта энергии внутрь плазмы. Было показано, что механизм распространения и поглощения СВЧ мощности напрямую связан с конфигурацией магнитного поля системы. В случае геликонного источника плазмы колебания напротив ухудшали параметры плазмы, в частности электронную плотность.

Литература

1. Козлов, О. В. Электрический зонд в плазме / О.В.Козлов. – Москва: АТОМИЗДАТ, 1969. – 228 с.

2. Чен Ф. Электрические зонды. Диагностика плазмы. / Ф. Чен. – Москва: Мир, 1967. – 322 с.

3. Merlino, R. L. Understanding Langmuir probe current-voltage characteristics //American Journal of Physics. – 2007. – Т. 75. – №. 12. – С. 1078-1085.

БЕСТОКОВЫЙ МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ ПЛАЗМЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ ДВОЙНЫМ ЗОНДОМ

Т.А. Ишков, С.С. Гусев*

НИЦ «Курчатовский Институт», Ishkov_TA@nrcki.ru

* Национальный исследовательский университет «МЭИ»

Двойные зонды Ленгмюра применяются уже десятки лет, однако данный метод измерения имеет как преимущества, так и недостатки, вызванные сложностью измерения зондового тока. К классическому методу обработки данных предложен бестоковый метод измерения температуры и плавающего потенциала.

Под бестоковым методом подразумевается метод измерения электронной температуры и плавающего потенциала без измерения зондового тока и обработки вольт-амперной характеристики

Данный метод опирается на измерение потенциалов зондов, описываемых известной формулой [1]

$$U_+ = \frac{kT_e}{e} \ln \left(1 + \tanh \left(\frac{e\Delta U}{2kT} \right) \right)$$

Для проверки метода использовался компенсированный [1] двойной зонд Ленгмюра и схема измерения на стенде ПН-3 [2].

Обработка результатов классическим методом и бестоковым показала, что отклонение значения электронной температуры не превысило 10% относительно классического метода.

Не смотря на невозможность измерения концентрации, данный метод может дополнить классический для верификации измеренной температуры и плавающего потенциала.

Литература.

1. Caneses J. F., Blackwell B. RF compensation of double Langmuir probes: modelling and experiment //Plasma Sources science and technology. – 2015. – Т. 24. – №. 3. – С. 035024.
2. Шуровский Д. О. и др. Оптические методы диагностики для измерения параметров плазмы в геликонном разряде //Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. – 2022. – Т. 45. – №. 2 – С. 97-104.

КОНЦЕПТУАЛЬНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ИНЖЕКТОРА ТОПЛИВА В ВИДЕ ПЕЛЛЕТ ДЛЯ ГИБРИДНОЙ РЕАКТОРНОЙ УСТАНОВКИ НА БАЗЕ ТОКАМАКА

А.Н. Бан 1, С.С. Ананьев 2

1 МГТУ им. Н.Э. Баумана

2 НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
ban.anastasia.ban@gmail.com, Ananyev_SS@nrcki.ru

Гибридная реакторная установка (ГРУ) на базе токамака [1], проектирование которой должно быть выполнено к 2035 году в рамках Федерального проекта ФП-3 “Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий” [2, 3] комплексной программы ГК Росатом “Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации на период до 2030 года”, должна продемонстрировать возможность использования быстрых нейтронов, получаемых в реакции синтеза для решения ряда ключевых задач атомной энергетики: наработки топлива, пережигания долгоживущих продуктов деления, испытания материалов и др. [4, 5].

Одной из систем, необходимых для обеспечения работы реактора, является система инжекции частиц в виде замороженных крупинок (пеллет), входящая в комплекс систем топливного цикла [6]. Инжекция в виде пеллет, прежде всего, направлена на ввод топлива в плазму для поддержания реакции синтеза, а также контроля неустойчивостей, локализованных на краю плазмы (ELM).

Инжекция пеллет на сегодняшний день рассматривается в качестве основного способа подпитки для современных токамаков ASDEX и JET и перспективных установок JT-60SA, ITER, DEMO и др. Пеллеты, сформированные в экструдере из газов различного состава инжектируются в плазму установки по направляющим трубкам путем ускорения в центробежной [7, 8] или газовой [9, 10] пушке – каждый из подходов имеет свои преимущества и недостатки. Ключевыми параметрами для эффективного ввода пеллет в основную плазму являются их скорость и направление инжекции. Так, инжекция частиц в пеллетах со стороны сильного магнитного поля (HFS) более эффективна [7], чем со стороны слабого (LFS), однако острее встает проблема с размещением инжекционных систем и потерями в направляющих за счет уменьшения массы пеллет при движении по криволинейным направляющим.

К настоящему моменту проанализированы сценарии работы ГРУ и оценены потоки изотопов водорода в системах инжекции [6, 11]. На основе этих данных может быть начато концептуальное проектирование инжектора пеллет для ГРУ. В докладе рассматриваются ключевые параметры уже действующих систем пеллет-инжекции и анализируются параметры, необходимые для проектирования аналогичной системы для гибридной реакторной установки на базе токамака.

Работа выполнена при частичной поддержке НИЦ «Курчатовский институт».

Литература.

1. Э.А. Азизов, Е.П. Велихов, Долгий путь к гибриду, *Природа*, №12 (1180), декабрь 2013, с. 8-16, www.ras.ru/publishing/nature.aspx
2. Паспорт федерального проекта Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий, <https://www.innov-rosatom.ru/>
3. В.И. Ильгисонис, К.И. Ильин, С.Г. Новиков, Ю.А. Оленин, О программе российских исследований в области управляемого термоядерного синтеза и плазменных технологий, *Физика плазмы*, 2021, том 47, № 11, с. 963–969., doi: 10.31857/S0367292121110172
4. Я.И. Штрומбах, А.Ю. Гагаринский, Перспективы ядерной энергетики, *Природа*, №12 (1180), декабрь 2013, с. 17-24, www.ras.ru/publishing/nature.aspx
5. Kuteev B.V., Goncharov P.R. Fusion-fission Hybrid Systems: Yesterday, Today, and Tomorrow, *Fusion Sci.Technol.* 2020. V. 76. Pp. 836—847, doi: <https://doi.org/10.1080/15361055.2020.1817701>
6. S.S. Ananyev, B.V. Ivanov, and B.V. Kuteev, Analysis of promising technologies of DEMO-FNS fuel cycle, *Fusion Eng. Des.*, 161, 111940 (2020), <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2020.111940>.
7. Ploekl B., Day C., Lamalle P., Lang P.T., Rohde V., Viezzer E. // *Fusion Eng. Des.* 2015. 96–97. P. 155.
8. Lang P.T., Nakano T., Davis S., Matsunaga G., Pégourié B., Ploekl B., Treuterer W. // *Fusion Eng. Des.* 2019. V. 146. P. 91.
9. Géraud A., Lennholm M., Alarcon T., Bennett P., Frigione D., Garnier D., Lang P.T., Lukin A., Mooney R., Vinyar I., JET-EFDA contributors // *Fusion Eng. Des.* 2013. V. 88. P. 1064.
10. Combs S.K., Baylor L.R., Meitner S.J., Caughman J.B.O., Rasmussen D.A., Maruyama S. // *Fusion Eng. Des.* 2012. V. 87. P. 634.

11. С. С. Ананьев и др., Потоки в системах топливного цикла ДЕМО-ТИН с учетом D- И Т-пеллет инжекции, Физика плазмы, 2022, том 48, № 3, с. 195–211, DOI: 10.31857/S0367292122030015

СОЕДИНЕНИЕ SMART СПЛАВОВ ВОЛЬФРАМА И RAFM СТАЛЕЙ МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПАЙКИ

В.О. Кириллова, А.Н. Сучков, Д.М. Бачурина, Ю.А. Гурова, Н.С.
Попов, Ш. Тан*

НИЯУ МИФИ, vok11012002@gmail.com
*Хэфейский Технологический Университет

В качестве перспективных материалов для компонентов, обращенных к плазме, рассматривают самопассивирующие сплавы вольфрама с низкой склонностью к окислению при повышенных температурах (SMART сплавы) [1-2]. При этом остро стоит вопрос соединения таких сплавов с малоактивируемыми ферритно-мартенситными сталями (RAFM) различных марок.

В данной работе предложен способ соединения SMART сплавов и RAFM сталей методом высокотемпературной пайки с использованием аморфного припоя 48Ti-48Zr-4Be мас.% [3]. Установлено, что «прямое» соединение вольфрамовых сплавов и сталей неэффективно из-за формирования остаточных напряжений и образования хрупких фаз. Предложено использование Ta в качестве промежуточного слоя – компенсатора остаточных напряжений. Показано, что для паяных соединений с Ta характерно образование «игольчатых» фаз Ta₂Be твердостью 700 HV_{0,1}. Установлено, что такие паяные соединения выдерживают 100 циклов нагрева-охлаждения в интервале температур 300–600°C без разрушения. По результатам механических испытаний установлено, что пределы прочности на срез составляют 187±96 МПа и 104±42 МПа для WCrY/Ta/Eurofer и WCrZr/Ta/CLAM соответственно.

Литература.

1. Sal E. et al. Microstructure, oxidation behaviour and thermal shock resistance of self-passivating W-Cr-Y-Zr alloys //Nuclear Materials and Energy. – 2020. – Т. 24. – С. 100770.
2. Litnovsky A. et al. New oxidation-resistant tungsten alloys for use in the nuclear fusion reactors //Physica Scripta. – 2017. – Т. 2017. – No. T170. – С. 014012.
3. Bachurina, D.; Suchkov, A.; Gurova, J.; Kliucharev, V.; Vorkel, V.; Savelyev, M.; Somov, P.; Sevryukov, O. Brazing Tungsten/Tantalum/RAFM Steel Joint for DEMO by Fully Reduced Activation Brazing Alloy 48Ti-48Zr-4Be. Metals 2021, 11, 1417.

СИСТЕМЫ ИНТЕНСИВНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ ПРИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВЫХ НАГРУЗКАХ НА ВОЛЬФРАМОВЫХ МОДУЛЯХ ОБЛИЦОВКИ ТЕРМОЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

С.В. Белоусов*, К.В. Чан*, К.А. Рогозин*, А.А. Коньков*, В.С.
Квасков*, Студенты; Рук. А.В. Карпов*, А.П. Слива*

НИЦ «Курчатовский Институт», Stefan.belousov@mail.com

* Национальный исследовательский университет «МЭИ»

В докладе будут представлены результаты испытаний системы охлаждения для вольфрамовых модулей (рис.1) облицовки термоядерного реактора. Основной системы охлаждения является форсунка, которая распыляет мелкодисперсную смесь воды и газа на внутреннюю поверхность модуля, тем самым обеспечивая теплосъём. Испытание образца производилось в установке АЭЛТК-344-12, представляющая собой вакуумную камеру с установленной внутри электронно-лучевой пушкой, которая может обеспечивать мощные пучковые нагрузки ~ 380 МВт/м². В камере может поддерживаться вакуум давлением 10^{-6} торр.

В результате испытаний определено, что при плотности мощности 21 МВт/м² в стационарном режиме система охлаждения не позволяет температуре спая подняться выше 450 °С.

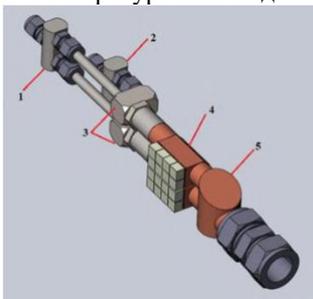


Рисунок 1 — 3D модель охлаждаемой модели на основе вольфрамовых модулей

1—входной водный коллектор, 2—входной воздушный коллектор, 3—двухфазные форсунки, 4—охлаждаемые вольфрамовые модули, 5 — выходной коллектор

Литература.

Захаренков А.В., Локтионов В.Д., Дедов А.В., Люблинский И.Е., Вертков А.В., Демидов А.С., Журавлев К.В., Польский В.И. Применение диспергированного газожидкостного потока для охлаждения энергонапряжённых элементов конструкций токамака. Вопросы атомной науки и техники. Серия: термоядерный синтез. 2021, с. 54.

ЧИСЛЕННАЯ КОРРЕКТИРОВКА ХРОНОГРАММ ПЛАЗМЕННОЙ ДИНАМИКИ, ПОЛУЧЕННЫХ НА УСТАНОВКЕ КАЛЬМАР МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО ТЕНЕВОГО ФОТОГРАФИРОВАНИЯ

Казаков Е.Д., Романова А.С.

НИЦ «Курчатовский институт»

Электронно оптическая регистрация применяется при исследовании процессов, требующих высокого временного разрешения, высокой чувствительности детектора и в ряде других случаев. В частности, электронно-оптические камеры (ЭОК) применяются в диагностических системах для исследования импульсных плазменных процессов. На сильноточном электронном ускорителе «Кальмар» для исследования регистрации динамики плазмы в вакуумном диоде используется высокоскоростная ЭОК ЭФЭР-6, работающая в хронографическом режиме [1]. Известно, что временная развёртка таких камер имеет нелинейность, приводящую к существенным систематическим ошибкам [2].

Для решения данной проблемы разработана программа, позволяющая снизить влияние этой нелинейности при обработке результатов. В программе определяются коэффициенты аппроксимирующей кривой, при которой отклонение от «функции нелинейности» минимально, и соответственно ей корректируется изображение с ЭОК.

С использованием разработанной программы была проведена корректировка ряда ЭОПграмм, полученных при исследовании взаимодействия сильноточного электронного пучка с конденсированными мишенями. Показано, что систематическая ошибка, связанная с нелинейностью развёртки могла превышать 10 %.

Данный подход может использоваться не только для плазменных исследований, но и для других работ, в которых ЭОК, работающая в хронографическом режиме применяется в качестве регистратора.

Литература.

1. Е.Д. Казакова, Ю. Г. Калинина, Д.И. Крутикова, А.А. Курилоа, М.Ю. Орлова, М.Г. Стрижакова, С.И. Ткаченко, А.Ю. Шашкова // Физика плазмы. - 2021. - том 47. - №8. - с. 716–72.

2. Пергамент М.И. Методы исследований в экспериментальной физике. - Долгопрудный: «Интеллект», 2010. 304 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МИКРОСТРУКТУРЫ Са-ЗАМЕЩЕННОГО НИКЕЛАТА ЛАНТАНА

Д.Д. Мищенко, З.С. Винокуров, А.Н. Шмаков

ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, q14999@yandex.ru

Перовскитоподобные слоистые оксиды, относящиеся к фазам Раддлсдена-Поппера 1-го порядка, являются перспективными материалами катодов среднетемпературных твердооксидных топливных элементов (СТ-ТОТЭ). Пристальное внимание исследователей приковано к составу $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ и его Са-замещенным производным, т.к. данные составы показывают хорошую термическую и химическую стабильность в рабочих условиях СТ-ТОТЭ вместе с приемлемыми электрохимическими характеристиками в тестовых ячейках [1].

В данной работе нами были изучены особенности поведения структуры и параметров элементарной ячейки $\text{La}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{NiO}_{4+\delta}$ в условиях, приближенных к рабочим для катода СТ-ТОТЭ (температура до 700 °С, воздушная и кислород-дефицитная атмосферы) методом *in situ* рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения на станции «Прецизионная дифрактометрия – 2» СЦСТИ ИЯФ СО РАН, а также на лабораторном дифрактометре Bruker D8 Advance (Германия) с использованием высокотемпературной камеры-реактора XRК-900 (Anton Paar, Австрия). Было обнаружено необычное поведение параметров элементарной ячейки для синтезированного образца, а также анизотропное уширение дифракционных рефлексов типа (001) после отжига образца при 250 °С. ТГА подтвердил, что наблюдаемые особенности проявляются до активации процесса потери кислорода структурой. Для объяснения причин наблюдаемых особенностей был привлечен HRTEM, который показал различие в дефектной структуре образца после различных температурных обработок.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта базового бюджетного финансирования ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН.

Литература.

1. Tarutin A.P. et al. Recent advances in layered $\text{Ln}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ nickelates: fundamentals and prospects of their applications in protonic ceramic fuel and electrolysis cells//Journal of Materials Chemistry A, 2021,

Vol. 9, Recent advances in layered $\text{Ln}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ nickelates, No. 1, P. 154-195.

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧНОГО ТЯЖЕЛОИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ ДИСПЕРСНО- УПРОЧНЕННОЙ ОКСИДАМИ СТАЛИ

А.А. Богачев, С.В. Рогожкин, А.А. Никитин, А.Л. Васильев,
М.Ю. Пресняков, М. Tomut*, Ch. Trautmann*

НИЦ «Курчатовский институт», bogachev@itep.ru

* GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH, Germany

Ряд актуальных задач: развитие ядерной энергетики, создание комплексов для изучения материи, освоение космического пространства, обуславливают необходимость в материалах, обладающих как высокой жаропрочностью, так и радиационной стойкостью при воздействии потоков высокоэнергетических частиц. Одним из перспективных материалов, отвечающих заданным требованиям, является дисперсно-упрочненная оксидами (ДУО) сталь. Материалы этого класса имеют сложную гетерогенную структуру, содержащую множество различных упрочняющих включений и их предвыделений. Передача энергии от ускоренных частиц вдоль траектории пролета в таких развитых системах носит нетривиальный характер и может способствовать изменению материала на наномасштабе. В данной работе методами высокоразрешающей электронной микроскопии с энергодисперсионной спектроскопией исследовалось влияние тяжелоионного облучения при комнатной температуре на микроструктуру дисперсно-упрочненной стали ODS Eurofer.

Облучение стали ODS Eurofer быстрыми ионами Au (945 МэВ, 1×10^{11} , 5×10^{12} и 1×10^{13} см⁻²) и Хе (167 МэВ, 1×10^{13} и 1×10^{14} см⁻²) привело к образованию аморфных областей в крупных оксидных частицах (более 8 нм). Эти структурные особенности являются треками от прошедших ионов, что согласуется с результатами исследований процесса трекообразования в оксидах иттрия [1]. Обнаружен эффект перестройки оксидов под облучением: растворение крупных оксидов и образование мелкодисперсной фракции частиц размерами < 5 нм.

Литература.

V.A. Skuratov, V.V. Uglov, J. O'Connell, A.S. Sohatsky, J.H. Neethling, S.V. Rogozhkin. J. of Nucl. Mat., 2013, V. 442, pp. 449-457.

ПРОЕКТ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ ЯДЕРНОГО DD-СИНТЕЗА С
ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ ИСХОДНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ
(POLFUSION)

А.Ю. Рождественский, В.Е. Ларионов

ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.
Константинова НИЦ «Курчатовский институт», anrozd@mail.ru

Реакция ядерного dd – синтеза может протекать по трем возможным каналам: $3\text{H} + p$ ($\approx 50\%$); $3\text{He} + n$ ($\approx 50\%$); $4\text{He} + \gamma$ ($\approx 10\text{--}7\%$).

Интерес к dd - синтезу вызван как со стороны фундаментальных исследований и астрофизики [1], так и прикладной науки, в частности, в области создания термоядерных реакторов [2]. В 1967–1968 годах в Курчатовском институте была предложена идея исследования реакции ядерного dd-синтеза с использованием поляризованных пучков дейтронов [3]. Развитие данной идеи получило продолжение в ядерно-физическом эксперименте PolFusion (Polarized Fusion).

Цель ядерно-физического эксперимента PolFusion – исследование реакции ядерного dd-синтеза с поляризованными исходными частицами в области низких энергий. В эксперименте будут измерены дифференциальные сечения рассеяния реакций dd-синтеза в конечном состоянии при различной взаимной ориентации спинов сталкивающихся дейтронов в диапазоне энергий 10–100 кэВ.

Для проверки работоспособности основных систем были проведены тестовые сеансы в 2015, 2019 [4] и 2020 годах с использованием различных мишеней.

Литература.

1. Бедняков В.А. О происхождении химических элементов, Физика элементарных частиц и атомного ядра, 2002, Т.33, № 4, С. 915–690.
2. Casey D. T. et al. Thermonuclear reactions probed at stellar-core conditions with laser-based inertial-confinement fusion, Nature Phys., 2017, Vol. 13. Issue 12, P. 1227-1231.
3. Adjasevich B., Antonenko V. Measurements of the polarization correlation coefficients in reactions $d(d, p)t$ and $d(d, n)3\text{He}$, Preprint IEA-2704, Moscow, 1976.

4. Solovyev A. Optimization and first tests of the experimental setup to investigate the double-polarized DD-fusion reactions, JINST, 2020, Vol. 15. № 6 (P0520). P. 15

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ ХРОМОНИКЕЛЕВОГО СПЛАВА 42ХНМ

Р.П. Хвостов, А.В. Голубева

НИЦ «Курчатовский Институт», ultra27082014@gmail.com

Хромоникелевый сплав 42ХНМ был разработан для оболочек ТВЭЛов. В данной работе впервые была исследована водородопроницаемость этого сплава. В экспериментах мембрана разделяла два вакуумных объёма, в одном из которых лицевая поверхность мембраны находилась в контакте с газообразным дейтерием, а во втором регистрировали поток дейтерия, прошедшего сквозь мембрану. Мембрана представляла собой трубку с толщиной стенки 0,4 мм. Газообразный дейтерий подавали в вакуумный объём, куда выходила внутренняя поверхность мембраны. Эксперименты проводили при температурах мембраны 300 и 500 °С и в диапазоне давлений дейтерия $5 \cdot 10^2 - 5 \cdot 10^4$ Па. Поток дейтерия, проникший сквозь мембрану и десорбировавшийся с её внешней поверхности, регистрировали квадрупольным масс-спектрометром. В ходе длительных экспериментов проникающий поток при одних и тех же условиях постепенно снижался. За всё время экспериментов, составившее десятки часов, потоки, проникающие через 42ХНМ при температуре 300 °С, снизились на порядок. Однако проникающие потоки в конце серии экспериментов оставались в десятки раз выше, чем через мембрану-трубку из стали ЧС68 близкой геометрии при тех же температурах и давлениях.

Анализ показал существенный рост концентраций кислорода и углерода на обеих поверхностях мембраны после экспериментов. В работе обсуждаются возможные причины роста содержания примесей на поверхностях и влияние примесей на проникновение дейтерия сквозь мембрану. Оценки коэффициента диффузии дейтерия в сплаве 42ХНМ при температуре 500 °С дали значения в диапазоне $1 - 4 \cdot 10^{-10}$ Д/м², что близко к коэффициенту диффузии дейтерия в стали ЧС-68 при тех же условиях [1].

Литература.

1. А.В. Голубева, Р.П. Хвостов, Д.И. Черкез и др., «Стенд для исследования проницаемости мембран при взаимодействии с газообразным водородом» // Приборы и техника эксперимента, 2022, № 5, с. 132-144

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ МЕТАЛЛО-ЗАПОЛНЕННОЙ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ БОРИДА ЛИТИЯ К ТЕПЛОВЫМ И ПЛАЗМЕННЫМ НАГРУЗКАМ

Р.А. Селиванов 1, И.А. Сорокин 1, 2, С.А. Крат 1

1 Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
2 Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Россия, Фрязино Московской обл

При разработке термоядерных установок остаётся актуальной проблема разрушения первой стенки под действием тепловых и плазменных потоков. Концепция жидкометаллической литиевой стенки токамака, обладает рядом преимуществ по сравнению с углеродными и металлическими стенками, такими как: меньшие радиационные потери (малое $Z=3$), способность к самовосстановлению и др.

Исследуемый композитный бор-литиевый композит представляет собой тугоплавкую матрицу заполненную литием, при определённых условиях работающую в режимах капиллярно-пористой системы (толщина волокон матрицы – 1 мкм, ячейки – 5 мкм). Возможно его использование как материала облицовки стенок установок с жидколитиевыми элементами.

Испытание образцов проводилось на стенде с дугой низкого давления на водороде. Средняя плотность мощности теплового и ионно-плазменного потока, воздействующей на образец, превышала 5 МВт/м². Характерное время испытаний составляло ~ 1 минуты, напряжение разряда ~ 30-40 В, ток разряда до 100 А. Образец являлся катодом.

Для решения задачи предварительного смачивания с дополнительным объёмом лития и растворения оксидных плёнок с поверхности образец был предварительно прогрет в камере установки в течении часа до появления металлического блеска на поверхности.

Была проведена серия экспериментов с различной конфигурацией образцов. В случае с подпиткой литием на микрофотографиях были обнаружены только разрозненные следы структуры борида лития. Также после распиливания образца были обнаружены полости, что может быть связано с неравномерностью нагрева и как следствие плохой локальной смачиваемости образца с литием. В результате контрольного эксперимента без подпитки литием

структура матрицы композита не была разрушена, однако наблюдается объемная деформация.

СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ЦИНКА

Е.П. Аверочкин

НИУ Московский Институт Электронной Техники,
aer1997@rambler.ru

Сенсибилизированные красителем солнечные элементы (DSSC) становятся многообещающими устройствами для эффективного преобразования солнечной энергии, поскольку они дешевы и просты в изготовлении. Считается, что одномерные (1D) наноструктуры ZnO, такие как наностержни (NR) повышают эффективность фотопреобразования в DSSC и прокладывают путь для прямого беспрепятственного переноса электронов. [1]

В данной работе были получены наностержни оксида цинка при температуре 80 °С в щелочном растворе NaOH и Zn(NO₃)₂·6H₂O с различным временем роста на подложке, а затем применены в качестве функционального слоя для сенсибилизированных солнечных элементов. Были получены характеристики фотоанодов, такие как вольтамперные (ВАХ) при освещении и временная зависимость напряжения холостого хода при включении/выключении освещения. Изображение SEM установило морфологию ZnO в форме стержней (рисунок 1).

Влияние времени роста в растворе было объяснено с помощью различных характеристик, а именно, SEM, EDXS, XRD и оптической спектроскопии. Полученные результаты могут быть использованы при создании и проектировании фотовольтаических устройств нового поколения.

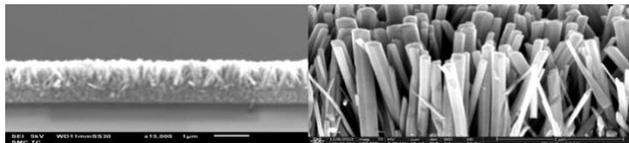


Рисунок 1. Снимки SEM поверхности наностержней ZnO, полученных в течение 30 мин (слева) и 120 мин (справа). Высота стержней 1,28 и 2,48 мкм соответственно.

Литература.

Kumar V., Gupta R., Bansal A., Hydrothermal Growth of ZnO Nanorods for Use in Dye-Sensitized Solar Cells. ACS Appl. Nano Mater. 2021. №4. p. 6212-6222.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЕННО-РАСПЛАВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ПИРОЛИЗА ПРИРОДНОГО ГАЗА

Е.Д. Кофанова, М.А. Деминский*, А.В. Лебедев*, Б.В. Потапкин

НИЦ «Курчатовский Институт», kofanova.ed@phystech.edu

* Кинтехлаб

Объектом исследования является технология получения водорода из природного газа на основе процесса пиролиза в расплаве металла при помощи барботажных реакторов.

Целью работы является теоретический анализ скоростей процессов в многофазной системе и определение оптимальных условий, таких как температура, давление, расход метана, геометрия реактора, способ ввода метана в расплав, высота расплава и других.

Для решения поставленных задач была разработана трехмерная многоуровневая модель процесса пиролиза метана в расплавленном реакторе использующая совместное решение уравнений многофазной гидродинамики и химической кинетики. Анализ производился для модельной установки, рассчитанной на производительность 10000 $\text{nm}^3/\text{час}$ в расплаве олова и железа.

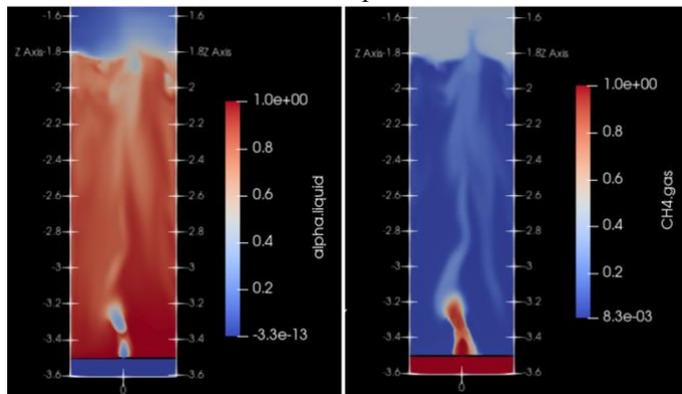


Рисунок 1. Осевые сечения профилей объемной доли жидкости (слева) и концентрация метана в газе (справа) для расплава Fe с диаметром форсунки 3 мм при $T=1350$ °C.

Было установлено, что оптимальным является такое сочетание параметров процесса, которое обеспечивает высокую степень газосодержания и необходимое время пребывания, что задаётся способом ввода метана посредством равномерно распределённых форсунок в днище реактора, высотой расплава и расходом газа.

ДИАГНОСТИЧЕСКАЯ СТАНЦИЯ АНАЛИЗА ПЕРВОЙ СТЕНКИ
Т-15МД ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПЛАЗМЕННО-СТЕНОЧНОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ПРОЦЕССОВ В SOL, ВЛИЯЮЩИХ НА
ДЛИТЕЛЬНОСТЬ ИМПУЛЬСА И СРОК СЛУЖБЫ ВНУТРИ-
КАМЕРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ ТОКАМАКА

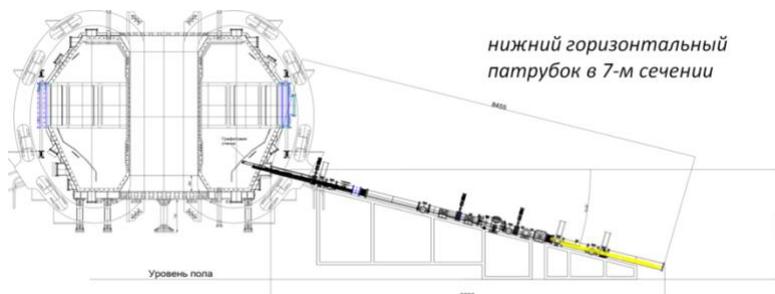
И.В. Ложкин, Е.А. Шрамков, Н.В. Коршунов, С.Н. Звонков, Г.Б.
Игонькина, М.М. Соколов

НИЦ «Курчатовский Институт», alfizik12@gmail.com,
Egor@shramkov.ru Национальный исследовательский университет
«МГТУ им. Н.Э. Баумана»,

НИЦ «Курчатовский Институт», korshyn-x3@yandex.ru
«Российский университет дружбы народов»

НИЦ «Курчатовский Институт», igonkina_gb@nrcki.ru,
sokolov_mm@nrcki.ru, snzvonkov@mail.ru

ДС АПС - WASA upgrade (WASA - Wall Analysis with SIMS and Auger) токамака Т-15МД является универсальным средством оперативной доставки различных зондов, образцов материалов и конструкций в пристеночную область плазмы (Scrape Off Layer — SOL) на границе с диверторной зоной, с последующим анализом поверхности средствами Оже и ВИМС без нарушения вакуумных условий, и предназначена для исследования плазменно-стеночного взаимодействия (Plasma surface interaction - PSI). ДС АПС даст возможность изучать потоки ионов и нейтральных частиц примесей в SOL в течение разряда с помощью коллекторных зондов с временным разрешением, электронных (например, ленгмюровских или болометрических), а также проводить материаловедческие исследования. Коллекторные зонды успешно применяются на токамаках ASDEX и DIII-D.



Основные задачи ДС АПС:

- получение данных о потоках частиц рабочего газа и примесей в SOL с временным разрешением в процессе эксперимента для оперативного анализа между импульсами;
- контроль кондиционирования камеры токамака;
- изучение процессов PSI: эрозии, распыления материала, адсорбции и десорбции примесей и рабочего газа, накопления запасов изотопов водорода с последующим его освобождением, изменения под действием плазмы и нейтронного облучения структуры поверхности первой стенки и дивертора, появления новых поверхностных слоев с последующим их разрушением, возникновением пыли;
- изучение влияния PSI на длительность импульса и срок службы материалов стенки;
- изучение влияния тепловых нагрузок на дивертор и первую стенку при срывах и граничных МГД колебаниях (ELM edge-localized mode);
- изучение переноса инжектируемых для снижения потока мощности на пластины дивертора примесей.

Литература.

1. Herrmann A., Hildebrand D., Wolff H., WASA-Team, ..., Igonkina G. et al. Sputtering and redeposition of impurities in T15 studied by collector probes / // 18. European conference on controlled fusion and plasma heating, Berlin (Germany), 3-7 Jun 1991, Europhysics Conference Abstracts, Switzerland, 15C:Part III; p. III-53-III-56
2. Alkhimovich V.A., Vertiporokh A.N., Igon'kina G.B. et al. T-15 Plasma Chamber Design And Testing / // Plasma Devices and Operations - 1992 -Т. 2 - С.27-46.

3. Zvonkov S., Igonkina G., Stefanovskij A., Herrmann A. Wall conditioning in T-15 Investigations of wall surface state by WASA II // 23rd European Physical Society Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics. Contributed Papers Part II, Kiev, Ukraine, 24-28 June 1996. p. 747-750.
4. П.П. Хвостенко, И.О. Анашкин, Э.Н. Бондарчук, Н.В. Инютин, В.А. Крылов, И.В. Левин, А.Б. Минеев, М.М. Соколов. Экспериментальная термоядерная установка токамак Т-15МД // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2019, т. 42, вып. 1, стр. 15-38.
5. W. Schustereder, K. Krieger, A. Herrmann, V. Rohde, Discharge resolved impurity flux measurements in the edge plasma of ASDEX Upgrade by exposure of collector probes // J. Nucl. Mater. 363365 (2007) 242246.
6. S. Zamperinia, D. Donovana, E. Unterbergb, P. Stangebyc et al., Transport of tungsten to collector probes in DIII-D // Nuclear Materials and Energy 18 (2019) 87-92.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДА ИСКЛЮЧЕННОГО ДАТЧИКА ПРЯМОГО ЗАРЯДА В СВРК

Н.О. Блохин, Д.Н. Скороходов

НИЦ «Курчатовский Институт», Blokhin_NO@nrcki.ru

Непрерывный контроль поля энерговыделения в реакторах типа ВВЭР возлагается на систему внутрореакторного контроля (СВРК), измерительными приборами которой являются бета-эмиссионные детекторы прямой зарядки (ДПЗ) [1]. Для корректного восстановления поля энерговыделения необходимо непрерывно контролировать достоверность показаний ДПЗ [2]. Одним из основных методов определения работоспособности датчика является метод исключенного ДПЗ (МИД).

Настоящая работа посвящена анализу существующей реализации МИД на основе данных эксплуатации и его совершенствованию. Было обнаружено, что метод исключенного ДПЗ, реализованный в составе СВРК, не использует информацию о геометрических особенностях расположения детекторов, что приводит к избыточной чувствительности метода и ложным рекомендациям на отбраковку.

В результате анализа были выделены четыре группы ДПЗ в зависимости от особенностей положения в реакторе, позволяющие учесть описанную выше систематическую ошибку. На основе разделения по группам был разработан усовершенствованный МИД. Испытание новой методики показало повышение эффективности обнаружения датчиков, показывающих недостоверные результаты.

Благодаря разработанной методике и совершенствованию вычислительных средств было принято решение разработать программу, которая позволит непрерывно контролировать качество сигналов внутрореакторных детекторов новым методом.

Литература

1. Митин В.И., Семченков Ю.М., Калинушки А.Е. Развитие системы внутрореакторного контроля ВВЭР. – Атомная энергия, 2009, т. 106, в. 5.
2. Курченков А.Ю., Ковель А.И., Мильто В.А., Мильто Н.В., Скороходов Д.Н., Липин Н.В., Воробьева Д.В. Тепловая мощность ВВЭР, измеренная по показаниям ДПЗ – ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2018, вып 5

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ТРИТИЯ В ЖИДКОСОЛЕВОМ ЯДЕРНОМ РЕАКТОРЕ

П.В. Гаца, В.В. Игнатъев

НИЦ «Курчатовский Институт», gatsa.p.97@gmail.com

Реакторная установка (РУ) с циркулирующим топливом на основе расплава солей фторидов лития и бериллия производит значительное количество трития за счёт ядерных реакций основных составляющих топливной соли с нейтронами [1]. При высоких рабочих температурах (600—750°C) тритий может диффундировать через металлические стенки реакторного оборудования и трубопроводов, влияя тем самым на экологическую ситуацию [2]. Авторами разработана и верифицирована методика расчёта распределения трития в реакторной установке этого типа. Расчётная методика основана на дифференциальных уравнениях баланса массы трития в элементах системы с учётом изменения соотношения химических форм трития за счёт окислительно-восстановительного потенциала соли [3]. Верификация расчётной методики проведена на экспериментальных данных, полученных в ходе эксплуатации исследовательской РУ типа Molten Salt Reactor Experiment (MSRE) проектной мощностью 10 МВт(т) с циркулирующим топливом состава Li,Be,Zr,U/F в ORNL (США) [4].

Литература.

1. Dolan K., Zheng G., Sun K., Carpenter D., Hu L.-W. Tritium generation, release and retention from in-core fluoride salt irradiations. — *Progress in Nuclear Energy*, 2021, vol. 131, p. 103576;
2. Барчуков В.Г., Кочетков О.А., Фомин Г.В., Кабанов Д.И., Иванов Е.А. Распространение трития и его соединений воздушным путем при нормальных условиях эксплуатации Балаковской АЭС. — *Аппаратура и новости радиационных измерений*, 2016, № 1, с. 49—54.
3. Гаца П.В., Шутова К.А., Закиров Р.Я., Игнатъев В.В., Фейнберг О.С. Моделирование поведения трития в жидкосолевоом ядерном реакторе. — *ВАНТ, сер. Физика ядерных реакторов*, 2022, вып. 2, с. 118–130;
4. Haubenreich P.N., Engel J.R. Experience with the Molten-Salt reactor experiment. — *Nucl. Appl. Technol.*, 1970, vol. 8, p. 118.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПИД-РЕГУЛЯТОРА НАГРЕВАТЕЛЯ В АМПУЛЬНОМ РЕАКТОРНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

А.Н. Абрамов, С.Е. Арефинкина, А.Д. Герстле, П.К. Ефремов,
О.В. Михин, В.Н. Мурашов

НИЦ «Курчатовский Институт», efremv17@yandex.ru

Проведение реакторных экспериментов в условиях, максимально приближенных к натурным, является важным этапом при разработке перспективных ядерных энергетических установок.

Данное исследование заключалось в моделировании параметров ПИД-регулятора (пропорционально-интегрально-дифференциальный регулятор) [1] нагревателя, применяемого в ампульном устройстве (АУ), которое планируется использовать в реакторе ИР-8 НИЦ «КИ» для испытаний опытных твэлов (имитаторов твэлов) в среде с параметрами, близкими к СКД (сверхкритическое давление). Работа осуществлялась в рамках выполнения предварительных оценок теплогидравлических параметров теплоносителя одного из возможных вариантов конструкции АУ. Расчеты проводились с использованием математического пакета MathCad.

Оценка коэффициентов расчетной формулы была основана на временных характеристиках переходной функции объекта регулирования, построенной по результатам численного эксперимента. Далее на основе принципов, предложенных в [2], коэффициенты варьировались. Были выбраны их оптимальные значения.

В результате проведенных расчетов получены параметры выхода АУ на рабочий режим. Система была приведена к стационарному состоянию. Полученные температуры участков циркуляционного контура ампульного устройства не выходили за требуемые границы. Было показано, что с ПИД-регулятором выход ампульного устройства на рабочий режим осуществляется более эффективно, чем без его использования.

Литература.

1. Измеритель-регулятор программный ТРМ251. Руководство по эксплуатации. – М: ОВЕН, 2022. – С. 1-104.
2. В. Денисенко. ПИД-регуляторы: принципы построения и модификации // СТА: Современные технологии автоматизации. – 2006. – № 4. – С. 66-74.

ОЦЕНКА ВЕЛИЧИНЫ МАКСИМАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ ПРИ РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА ВО ВЗРЫВООПАСНОЙ СМЕСИ

А.С. Грязев¹, Ю.К. Жулина^{1,2}, А.М. Осипов¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»,

² Национальный исследовательский университет «МЭИ»,
yuliya.zhulina.01@mail.ru

Обоснование водородной взрывобезопасности при проектировании и эксплуатации АЭС является важной задачей. Детерминистический анализ аварий на АЭС со взрывом водорода необходим для оценки возможных последствий, количественных и качественных. Эти данные необходимы для проведения вероятностного анализа безопасности блока и станции в целом.

С помощью подхода, использующего адиабату Гюгонио [1, 2], в работе были рассчитаны параметры детонационной волны, в том числе и максимальное давление взрыва p_{max} . Было исследовано влияние изменения объемной доли водорода $\omega(\text{H}_2)$ в смеси с воздухом на давление, возникающее при детонации водорода.

Отмечено, что значение максимального давления детонации p_{max} имеет максимум при изменении объемной доли водорода $\omega(\text{H}_2)$ для условия стехиометрической смеси (2 моля H_2 на 1 моль O_2). При меньших значениях $\omega(\text{H}_2)$ рекомендуемое в [3] максимальное давление детонации существенно больше рассчитанного с использованием представленного подхода.

На примере анализа ситуации с выделением водорода в пространстве бассейна выдержки отработавшего топлива РБМК-1000 в ходе запроектной аварии продемонстрирована возможность снижения консервативности результатов оценки избыточного давления взрыва на элементы конструкции реакторного здания. Подстановка максимального давления p_{max} , рассчитанного с помощью адиабаты Гюгонио, при малых объёмных долях водорода снижает величину получаемого избыточного давления [3].

Литература.

1. Зельдович Я.Б., Компанец А.С. Теория детонации. М., Гостехиздат, 1955, 268 с.
2. Баум Ф.А., Станюкович К.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва. М., Физматгиз, 1959, 800 с.

3. ГОСТ Р 12.3.047-2012. Пожарная безопасность технологических процессов.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПА РОСТА ТЕПЛОВОЙ НАГРУЗКИ НА КРИВУЮ КИПЕНИЯ

М.И. Делов, Д.М. Кузьменков, К.В. Куценко, А.А. Лаврухин

Национальный исследовательский ядерный университет
«МИФИ», dmkuzmenkov@mephi.ru

При нарушении нормальных условий эксплуатации в тепловом энергетическом оборудовании возникают переходные и нестационарные режимы теплообмена, которые могут сопровождаться изменением теплового потока. При анализе таких процессов коэффициент теплоотдачи принимается равным стационарному значению [1]. Это предположение нуждается в обосновании, так как динамическая кривая кипения может существенно отличаться от квазистационарной. В работе представлено экспериментальное исследование влияния темпа роста тепловой нагрузки на кривую кипения жидкого азота.

На рис. 1 представлены квазистационарная кривая кипения жидкого азота (точки), а также динамические кривые кипения для различных темпов нарастания токовой нагрузки (линии 1-4). Эксперименты показали, что, начиная с некоторого темпа увеличения тепловой нагрузки, характер динамических кривых кипения меняется (линия 4 на рис. 1). Основное отличие от квазистационарной кривой кипения –

отсутствие стадии пузырькового кипения. Кризис теплообмена происходит при минимальном нестационарном критическом тепловом потоке, $q_{cr.min}$ ($5,4 \cdot 10^4$ Вт/м²), и средний темп роста теплового потока – при $3,5 \cdot 10^4$ Вт/(м²·с), что соответствуют экспериментальным данным и расчету по модели в работе [2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 22-29-01009).

Литература.



Рис. 1 – Квазистационарная и динамические кривые кипения

1. Levin, P. Khan, Appl. Therm. Eng. 149, 1215-1222 (2019).
2. M.I. Delov et al., Int. J. Heat Mass Transf. 157, 119941 (2020).

МУЛЬТИФИЗИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЖИДКОСОЛЕВЫХ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

К.С. Куприянов

НИЦ «Курчатовский Институт», bdf-1@mail.ru

Жидкосольевые ядерные реакторы (ЖСР) с циркулирующим топливом обладают рядом физических особенностей, которые нелинейно и в значительной степени связывают нейтронно-физические и теплогидравлические процессы, происходящие в реакторе. В нашей стране и за рубежом проводятся активные исследования по созданию специализированного мультифизического расчетного инструмента, предназначенного для анализа ЖСР [1,2]. Автором был создан расчетный комплекс (ПК) MULTIMSR, который на данный момент находится на этапе развития, позволяющий моделировать жидкосольевые реакторы различного типа. Расчетный комплекс состоит из нескольких программ, работающих в единой структуре и имеющих возможность обмениваться информацией между друг другом. На данный момент ПК MULTIMSR использует программное средство (ПС) SERPENT [3] для проведения нейтронно-физических расчётов методом Монте-Карло, библиотеку вычислительных операций OpenFOAM [4], базу данных и общую объединяющую подпрограмму, необходимую для согласованной работы элементов ПК и проведения мультифизических расчетов.

Литература.

1. Aufiero, Manuele. (2014). DEVELOPMENT OF ADVANCED SIMULATION TOOLS FOR CIRCULATING-FUEL NUCLEAR REACTORS. Doctoral Dissertation, Politecnico di Milano, Italy, DOI: 10.13140/2.1.4455.1044. 133p.
2. M. Tiberga, D. Lathouwers, J.L. Kloosterman, "A discontinuous Galerkin FEM multi-physics solver for the Molten Salt Fast Reactor", International Conference on Mathematics and Computational Methods applied to Nuclear Science and Engineering, 2019.
3. Leppanen J. Serpent — A Continuous Energy Monte-Karlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, Helsinki, VTT Technical Research Centre of Finland, 2013;
4. Jasak, H., Jemcov, A., and Tukovic, Z. (2007). OpenFOAM: A C++ library for complex physics simulations. In International Workshop

on Coupled Methods in Numerical Dynamics, IUC, Dubrovnik, Croatia,
September 19-21, 2007.

РАЗРАБОТКА КОНЦЕПТУАЛЬНОГО ПРОЕКТА НАСЕЛЕННОГО ПУНКТА АРКТИЧЕСКОЙ ЗОНЫ, БАЗИРУЮЩЕГОСЯ НА РЕАКТОРЕ «ЕЛЕНА-АМ», КАК ОСНОВАННОГО ЭЛЕМЕНТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

К.С. Мирошниченко

НИЦ «Курчатовский Институт», hey.km.12@gmail.com

Вопрос о создании новых типов жилищ в условиях Крайнего Севера стал актуален в связи с активным развитием Северного морского пути и установкой совершенно нового источника энергии – атомной теплоэлектростанции «Елена-АМ». На данный момент ситуация с жилым фондом в Арктике критическая в связи с тем, что состояние инфраструктуры отстает от предъявляемых условий безопасности и комфорта для проживания. «Елена-АМ» дает возможность создать современное поселение, отвечающее запросам зоны сурового климата. Формирование новой жилой среды, созданной на базе анализа существующих северных поселков, — это первый шаг к решению существующих проблем.

На основе проведенных исследований было принято решение о создании концептуального проекта криптоклиматического комплекса. Он представляет собой комплекс из нескольких основных блоков, соединенных отопливаемыми пешеходными галереями, для комфортного передвижения. Блоки-корпусы разделены на жилые и общественные, имеют крупные габариты и строгое функциональное зонирование.

Крупные размеры корпусов обусловлены целью создать максимально благоприятные условия для постоянного проживания в данном поселении, - общественные рекреационные территории, зоны тихого и активного отдыха предусматриваются внутри зданий. Так как полгода Арктика пребывает в полярной ночи, а среднегодовая температура ниже нулевой отметки по Цельсию, люди лишены возможности использовать придомовые территории так, как это делают жители в нормальных климатических условиях.

Стоит сделать акцент на том, что новое поселение отказывается от дизельных котельных, на которых работают практически все существующие поселки. Основным объектом инфраструктуры послужит автономная атомная тепло-электростанция «Елена АМ». Во-первых, это решает проблему северного завоза. Во-вторых, атомная установка не имеет никаких выбросов в окружающую

среду, то есть является источником абсолютной экологически чистой энергии. Использование саморегулируемого водо-водяного реактора, термоэлектрического метода преобразования энергии и естественной циркуляции теплоносителей позволяет исключить из технологической схемы станции подвижные элементы и обеспечить работу на энергетическом режиме без вмешательства оператора в течение всей кампании (до 25 лет) без перегрузки топлива.

МЕТОДИКА РАСЧЁТА ВЫБРОСОВ РАДИОАКТИВНЫХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ В АВАРИЯХ С ПОСТУПЛЕНИЕМ ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ ПЕРВОГО КОНТУРА ПОД ЗАЩИТНУЮ ОБОЛОЧКУ РЕАКТОРОВ ТИПА ВВЭР

А.А. Гирченко, В.А. Мякиш, Д.К.Сапрыкин

НИЦ «Курчатовский Институт», vamyakish@mail.ru

Обоснование радиационной безопасности является одной из важнейших задач, которые необходимо решать при проектировании и продлении сроков эксплуатации АЭС, внедрении новых топливных циклов и видов топлива, а также при повышении планируемого выгорания топлива и мощности реактора.

Анализ аварий является неотъемлемой частью анализа безопасности АЭС. В зависимости от сценария протекания аварии выброс продуктов деления в окружающую среду формируется за счет нескольких путей поступления: неплотности защитной оболочки, вентсистемы, протечки из первого контура во второй, аварии с течами из первого контура во второй, паросбросные устройства второго контура и т.п. Для всех этих путей поступления радионуклидов в окружающую среду разрабатываются отдельные методики. Целью данной работы является методика для расчета аварийного выброса продуктов деления с учетом физико-химических процессов в системе локализации при авариях с течами теплоносителя первого контура.

Результатом работы является методика проведения расчета выброса радиоактивных продуктов деления при авариях с течью теплоносителя первого контура под защитную оболочку реакторов типа ВВЭР. Представлена модель, описывающая процесс переноса радиоактивных продуктов деления из топлива под оболочку реактора и используемая при расчете выброса. Сформулирован общий алгоритм анализа аварий на АЭС с ВВЭР, сопровождающихся поступлением теплоносителя первого контура под защитную оболочку реактора.

ОЦЕНКА АКТИВАЦИИ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ВВЭР-1200

Л.Ф. Бабичев, И.В. Руденков

Государственное научное учреждение «Объединенный институт
энергетических и ядерных исследований – Сосны»,
ivanton.rudziankou@gmail.com

Под действием радиации в ходе работы АЭС её конструкционные материалы облучаются и со временем начинают сами испускать вредоносное для персонала станции излучение. При выводе АЭС из эксплуатации и захоронении материалов необходимо оценить категорию радиоактивных отходов (РАО), к которой будут принадлежать те или иные конструкционные материалы.

Оценка активации проводится с помощью двух различных подходов:

1. С использованием специализированных инженерных кодов (DOT3-ANISN, КАТРИН 2.0-2.5, БИПР-7А.
2. С помощью Монте-Карло моделирования (Serpent, MCNP, MCU).

С помощью связки Serpent-DYN3D [1,2] была разработана методика оценки активации конструкционных материалов и расчета нейтронных потоков, и их функционалов для различных квазистационарных состояний. Код Serpent позволяет рассчитывать константы [3], необходимые для работы DYN3D, который, в свою очередь, позволяет оценить материальный состав на любой момент кампании АЭС. Используя эту связку можно получить распределение материального состава ТВС, которое позволяет повысить точность оценки активации в ходе кампании с помощью Serpent.

Литература.

1. J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta, and T. Kaltiaisenaho. "The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013." *Ann. Nucl. Energy*, 82 (2015) 142-150.
2. Kliem, S et al "The reactor dynamics code DYN3D" *Kerntechnik*, vol. 81, no. 2, 2016, pp. 170-172. <https://doi.org/10.3139/124.110692>.
3. Fridman, E. and Leppänen, J. (2011) "On the use of the Serpent Monte Carlo code for few-group cross section generation." *Ann. Nucl. Energy*, 38 (2011) 1399-1405.

О НОВЫХ ПОДХОДАХ К МОДЕЛИРОВАНИЮ УЛАВЛИВАНИЯ АЭРОЗОЛЕЙ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ КАПЛЯМИ СПРИНКЛЕРНОЙ СИСТЕМЫ

С.С. Савекин, Ю.Б. Шмельков

НИЦ «Курчатowskiй Институт», Savekin_SS@nrcki.ru

Несмотря на то, что атомная энергетика является перспективной технологией, ключевым вопросом остается безопасность АЭС в условиях маловероятных аварий. Основа безопасного использования возможностей атомных станций – предотвращение и ограничение выхода радиоактивных продуктов деления за пределы барьеров безопасности и смягчение последствий их выхода в части воздействия на население, персонал и экономику. Для решения этой задачи современные АЭС оснащены системами безопасности, одной из которых является спринклерная система. Спринклерная система применяется в защитной оболочке для снижения давления, отвода тепла и снижения концентрации радиоактивных веществ, в частности аэрозолей ПД, йода и его соединений.

В настоящем докладе представлен новый подход к расчетному моделированию улавливания радиоактивных аэрозолей, который был реализован в рамках аттестованных ПС ИРКА и МАВР-ТА [1, 2]. ПС ИРКА предназначено для количественного описания переноса и осаждения продуктов деления в защитной оболочке АЭС с ВВЭР и расчёта выброса изотопов радиоактивных ПД в окружающую среду при нарушениях нормальной эксплуатации, включая проектные аварии и запроектные аварии без плавления топлива, ПС МАВР-ТА – для расчета запроектных аварий с плавлением топлива. Также поднят вопрос о влиянии плотности аэрозольных частиц на улавливание их каплями спринклерной системы, проиллюстрировано текущее состояние вопроса моделирования плотности радиоактивных аэрозолей на примере результатов экспериментов серии Phebus-FP [3].

Литература.

1. ИРКА. Аттестационный паспорт программного средства № 572 от 5 декабря 2022 г.
2. МАВР-ТА. Аттестационный паспорт программного средства № 535 от 5 ноября 2021 г.

3. M. Laurie, P. March, B. Simondi-Teisseire, F. Payout. *Annals of Nuclear Energy* 60 (2013).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ В ПЕРВОМ КОНТУРЕ РЕАКТОРНОЙ УСТАНОВКИ ПРИ ТЯЖЕЛЫХ АВАРИЯХ НА АЭС С ВВЭР

Е.С. Сарычев, Ю.Б. Шмельков

Национальный исследовательский университет «МЭИ»,
SarychevYS@mpei.ru
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Sarychev_ES@nrcki.ru

При проектировании АЭС одной из важнейших задач является обеспечение безопасности работников АЭС во время ее эксплуатации, а также населения прилегающих территорий.

В настоящей работе рассмотрен перенос продуктов деления в первом контуре РУ на основании моделирования серии экспериментов FALCON ISP-1, ISP-2 [1] и эксперимента Marviken АТТ-4 [2]. Оба эксперимента проводились с целью изучения и исследования процессов переноса и осаждения ПД на внутренних поверхностях первого контура.

Эксперименты отличаются геометрией и составами несущих газов и аэрозолей. Для моделирования экспериментов было использовано программное средство МАВР-ТА [3]. На рисунке 1 представлено сравнение экспериментальных и расчетных данных осевшей массы кадмия эксперимента FALCON ISP-2. Расчетные результаты качественно соответствуют экспериментальным данным.

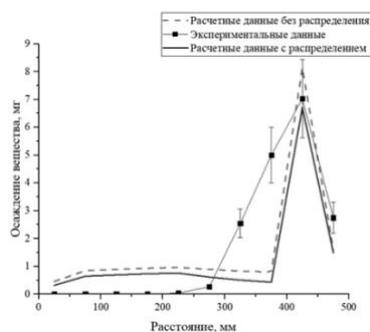


Рисунок 1. Осаждение кадмия на стенках трубки.

Литература.

1. Siccama N.B. MELCOR 1.8.1 Assessments: FALCON ISP-34 ECN-R--94-009, The Netherlands Energy Research Foundation, Petten, 1994.
2. Kmetyk L.N. MELCOR 1.8.1 Assessments: Marviken-V Aerosol Transport Tests АТТ-2b/ АТТ-4 SAND92-2243, Sandia National Laboratories, Albuquerque, 1993.
3. Шмельков Ю.Б., Звонарев Ю.А., Петров Л.В., Шутов Н.В. Разработка и верификация кода МАВР-ТА для моделирования выхода продуктов деления и их переноса под защитной оболочкой при

тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР // Вестник атомной науки и техники.
Серия: Физика ядерных реакторов. Выпуск 5. С. 92-104.

ВЛИЯНИЕ НАВОДОРОЖИВАНИЯ АНОДА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ ВОДЫ С ТПЭ

А.А. Засыпкина, Б.В. Иванов, Н.А. Иванова, Р.М. Меншарапов, Ю.С.
Пак, М.В. Синяков*, Д.Д. Спасов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский
институт», mmatveimatvei4@gmail.com

*Российский химико-технологический университет им. Д.И.
Менделеева «РХТУ»

В данной работе исследовалось влияние водородного насыщения титановых коллекторов тока на электрохимические характеристики электролизёров воды с твердым полимерным электролитом. Наводороживание титановых образцов проводилось методом сорбции из газовой фазы при нагревании с проведением предварительной вакуумной дегазации. Все образцы были исследованы методами сканирующей электронной микроскопии и рентгеноструктурного фазового анализа. Также были получены вольтамперные характеристики лабораторной ячейки электролизера воды с исследуемыми образцами. В результате было показано влияние увеличения концентрации водорода в титановых коллекторах тока на вольтамперные характеристики устройства. С ростом концентрации водорода наблюдается снижение эффективности работы ячейки, связанное с образованием гидридов титана на поверхности титановых коллекторов тока [1, 2].

Таблица 1. Значения напряжения ячеек с разным содержанием водорода

Образец	ат. % H	U (В)
1	9.7	1.786
2	35.9	1.790
3	50.2	1.826

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации МК-4120.2022.1.3.

Литература.

1. M. Ito, et al., J. Alloys Compd., 2006, P, 25–28.
2. V. Madina, I. Azkarate, Int. J. Hydrogen Energy., 2009, p. 5976-5980.

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ ПОКОЛЕНИЯ IV ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ВОДОРОДА

С.Х. Газаи, К.А. Найпак, Х. Садеги, Е.А. Соколова

ФГАОУ ВО «СПОТУ», sokolenergo@mail.ru

В последние годы население Земли значительно растет. При такой же интенсивности роста населения планеты происходит и интенсивное сокращение запасов традиционных источников энергии. Эти факторы заставляют задуматься о необходимости разработки новых альтернативных, безуглеродных источников энергии. В настоящее время проблема нехватки ископаемых энергоносителей стоит очень остро. Необходимость сокращения выбросов парниковых газов на 25-40% к 2030 году в связи с Парижским соглашением привела к тому, что водород стал одним из перспективных решений проблемы изменения климата. В России правительство начало исследования водородной экономики в 2020 году, а к началу 2022 года была опубликована водородная стратегия страны.

Известно, что водород может быть получен с помощью любого вида энергоисточника: традиционного (ископаемое топливо), возобновляемого (солнечная или ветроэнергетика) или атомного. Однако производство водорода с использованием ядерных реакторов IV поколения рассматривается как новый, экологически чистый, безопасно производимый и экономически устойчивый энергоноситель [1]. В настоящее время в производстве водорода с использованием ядерной энергии находят практическое применение только процессы, протекающие при низких температурах. Причиной этого является неспособность ядерных реакторов третьего поколения поддерживать высокие температуры. Однако разработка реакторов четвертого поколения позволит производить водород наиболее эффективными и дешевыми способами уже при высоких температурах [2].

Литература.

1. Hydrogen Production Using Nuclear Energy. 2013, Vienna: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY.
2. Wang, Q., et al., Thermo-economic analysis and optimization of the very high temperature gas-cooled reactor-based nuclear hydrogen production system using copper-chlorine cycle. International Journal of Hydrogen Energy, 2021. 46(62): p. 31563-31585.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО СМЕШЕНИЯ И ГОРЕНИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ ТОПЛИВО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ

И.В. Семенов, Р.С. Соломатин

ФГУ ФНЦ НИИ Системных исследований РАН,
roman.solomatin.94@gmail.com

Работа посвящена разработке комплексной физико-математической модели для проведения предсказательного моделирования процессов смешения и горения в сверхзвуковых газовых потоках с использованием современных подходов.

В данной работе рассматривается газодинамическая модель, основанная на решении аналога системы осредненных уравнений Навье-Стокса, записанной для многокомпонентных смесей. Для моделирования турбулентности применяются осредненный подход RANS и современный гибридный вихреразрешающий подход IDDES. В качестве модели турбулентности используется модель SA. Химические реакции между компонентами смеси моделируются с применением детального кинетического механизма, имеющего зависимость как от температуры, так и от давления. Интегрирование по времени выполняется с использованием гибридных схем: явно- неявной схемы, а также модифицированной схемы Кранка-Николсон. Основным численным методом является параллельная реализация GMRES-LU-SGS алгоритма. Система кинетических уравнений интегрируется с помощью методов Гира.

С использованием разработанной модели решается задача о моделировании физико-химических процессов в камере сгорания Барроуса-Куркова [1] с применением RANS и IDDES подходов. RANS расчеты были проведены как в 2D, так и в 3D постановках и отличались учетом боковых пограничных слоев на стенках камеры. В работе были рассмотрены как случай смешения водорода с потоком инертного газа без учета химических реакций, так и случай, когда водород смешивается с потоком горячего воздуха и происходит дальнейшее воспламенение смеси.

Расчеты выполнялись на сетках с разрешением пограничных слоев с размером первой пристеночной ячейки. Результаты численного исследования сравнивались между собой с целью оценки разницы в работе подходов, а также с экспериментальными [1] и расчетными [2]

данными других авторов. Было получено хорошее согласие между результатами.

Расчеты выполнялись на кластере “МВС-10П” МСЦ РАН.

Литература.

1. Burrows, M.C., and A.P. Kurkov. 1973. “Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Airstream”, NASA-TM-X-2828.
2. Edwards, J.R., J.A. Boles, and R.A. Baurle. 2012 “Large-eddy/ Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation of a supersonic reacting wall jet” *Combustion and Flame* 159: 1127–1138.

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА МЕСТНОГО ГИДРАВЛИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ТРЕХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.С. Кислов, И.С. Корягин, Н.Н. Теплякова

НИЦ «Курчатовский Институт», Teplyakova_NN@nrcki.ru

Для инженерных теплогидравлических расчетов сложных энергетических систем (моделирование работы установки в реальном времени и др.) в основном применяются упрощенные (инженерные) методы. Местные гидравлические сопротивления в подобных случаях учитываются при помощи соответствующих коэффициентов, полученных экспериментально и приведенных в справочной литературе [1,2].

В случае, когда параметры моделируемого узла выходят за рамки справочных данных, для определения гидравлических потерь возникает необходимость проведения эксперимента или разработки сложной математической модели [3-4]. В настоящей работе предлагается метод, заключающийся в использовании трехмерного конечно-элементного моделирования с последующей обработкой результирующих полей. Применение метода рассматривается на примере определения коэффициента местного гидравлического сопротивления пространственного разворота на 180° (труба Фильда). Погрешность предложенного метода по сравнению с экспериментальными данными составляет порядка 5% [5].

Литература.

1. Идельчик И. Е. Справочник по гидравлическим сопротивлениям. М.: Машиностроение, 1992, 672 с.
2. РБ-040-09. Расчетные соотношения и методики расчета гидродинамических и тепловых характеристик элементов и оборудования водоохлаждаемых ядерных энергетических установок.
3. Анучин М. Г., Анучина Н. Н., Волков В. И., В. А. Гордейчук, Н. С. Еськов, О. М. Козырев. Матем. моделирование, 2006, том 18, № 6. С. 109–126.
4. Chemezov D. ISJ Theoretical & Applied Science, 2017, 01 (45). С. 14-38.
5. Идельчик И. Е., Гинзбург Я. Л. Теплоэнергетика, 1968. №4. С. 87-90.

КОНВЕРСИЯ БИОГАЗА В ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ НА ПОСТОЯННОМ ТОКЕ

А.В. Казак, А.А. Кириллов, Л.В. Симончик, Н.В. Томкович

Институт физики НАН Беларуси им. Б. И. Степанова,
mikalaitomkavitch@yandex.by

Биогаз в основном состоит из метана (50–75%) и углекислого газа (25–50%) с малыми добавками других газов, таких как сероводород, аммиак, водород, азот, кислород и пары воды [1]. Обычное использование биогаза – прямое сжигание для производства тепла и электричества, но тепловая ценность уменьшается из-за высокой концентрации углекислого газа в биогазе. Следовательно, более эффективно преобразовывать биогаз в синтез-газ ($\text{CO} + \text{H}_2$) посредством риформинга.

В работах [2,3] была продемонстрирована высокая эффективность конверсии этанола в синтез-газ в несамостоятельном тлеющем разряде атмосферного давления при постоянном токе в трёхэлектродной конфигурации. Плазмохимический реактор, основанный на данной конфигурации, был адаптирован для конверсии смеси CH_4 и CO_2 в синтез-газ.

Определены электрические характеристики самостоятельного тлеющего разряда в углекислом газе при атмосферном давлении, являющимся поддерживающим разрядом для несамостоятельного разряда в соседней секции (плазменный катод).

Показано, что основными продуктами конверсии биогаза являются CO и H_2 , мольные доли которых составили 45% и 39%. Достигнутая степень конверсии составила 83% для углекислого газа и 78 % для метана.

Показано, что степень конверсии возрастает при увеличении времени пребывания реакционной смеси в активной зоне реактора и с увеличением мощности, вкладываемой в несамостоятельный разряд.

Литература.

1. H.J. Alves, C.B. Junior, R.R. Niklevicz et al., Int. J. Hydrogen Energy 38, 5215 (2013).
2. V.I. Arkhipenko, A.A. Kirillov, L.V. Simonchik et al., Open Chem. 13, 292 (2015).
3. V.I. Arkhipenko, A.A. Kirillov, L.V. Simonchik et al., Int. J. Hydrogen Energy 41, 18320 (2016).

ГЕНЕРАЦИЯ ВОДОРОДА В ХОДЕ ТЯЖЕЛОЙ АВАРИИ С ПОЛНЫМ ОБЕСТОЧИВАНИЕМ РБМК

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

НИЦ «Курчатовский Институт», tupotilov_ia@nrcki.ru

В настоящий момент на территории Российской Федерации эксплуатируется восемь энергоблоков РБМК-1000 и три энергоблока работают в режиме без генерации, иными словами, остановленными для вывода из эксплуатации. Для повышения безопасности эксплуатации АЭС с реакторами типа РБМК-1000 в настоящее время ведутся работы по разработке и обоснованию алгоритмов управляющих действий персонала в условиях тяжелых аварий для всех режимов работы энергоблока.

Для разработки стратегии управления запроектной аварией на стадии тяжелого повреждения активной зоны была выбрана авария с полным длительным обесточиванием энергоблока, которая по тяжести последствий включает в себя все другие аварии и в тоже время допускает возможность реализации мероприятий.

При моделировании этой аварии одними из главных вопросов являются подкритичность реактора в ходе аварии, генерация водорода и активности выходящих продуктов деления.

Эффекты реактивности сопутствующие разогреву активной зоны в ходе аварии с полным обесточиванием обсуждались в [1], в данной работе представлены результаты расчетов относительно водородной проблемы.

Приводятся зависимости температур топлива в ходе аварии для различных режимов эксплуатации энергоблока, включая остановленный для вывода из эксплуатации. Показаны зависимости массы сгенерированного водорода вследствие пароциркониевой реакции от времени, а также обсуждаются возможные меры по снижению генерации водорода на тяжелой стадии аварии. Необходимо также оговориться, что именно пароциркониевая реакция вносит основной вклад в генерацию, иными механизмами образования водорода, например, радиолизом, вклад от которого составляет порядка 0.5%, можно пренебречь.

Литература.

1. А.В. Краюшкин, И.А. Тупотилов // Запроектная авария с полным обесточиванием РБМК. Анализ возможности

возникновения повторной критичности / Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. – 2022. – №. 5. – С. 90-96.

МЕТОД РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЙОДА В СИСТЕМАХ АЭС С ВВЭР

О.С. Быстрова, В.А. Грачев, А.Б. Сазонов, К.Д. Хорошилова

НИЦ «Курчатовский Институт», krissi95@yandex.ru

Радиоактивные изотопы йода входят в перечень основных дозообразующих радионуклидов, образующихся при работе АЭС с ВВЭР. Однако до сих пор не существует методики, позволяющей корректно рассчитывать поступление изотопов йода в жидкие и парогазовые среды АЭС и его распределение между фазами при расчете радиоактивных выбросов в окружающую среду.

Одним из основных факторов, оказывающих влияние на распределение йода между жидкостью и паром, является концентрация летучих форм йода в жидкости (I_2 и НОI). Для реалистичной оценки радиоактивных выбросов необходимо знать значения концентраций этих форм йода в каждый момент времени с учетом изменяющихся внешних условий (состав, температура, концентрация общего йода). В связи с этим был разработан метод, позволяющий проводить такие расчеты с учетом кинетики основных химических реакций йодсодержащих частиц и изменений текущих параметров раствора.

Перед применением расчетной методики на практике необходимо было проверить ее на адекватность получаемых результатов. С этой целью был поставлен и проведен эксперимент по квазиравновесной перегонке водных растворов, имитировавших теплоноситель первого контура ВВЭР, с добавлением йода при заданных значениях температуры, рН и концентрации борной кислоты. Полученный дистиллят анализировали на содержание общего йода, I_2 и I. При сравнении расчетных данных с экспериментальными было найдено, что характер экспериментальных зависимостей в обоих случаях одинаков для всех измеряемых концентраций, и разработанная методика дает, таким образом, корректные результаты.

Проведенный эксперимент позволил также уточнить значения относительной летучести НОI. Результаты эксперимента показали, что с увеличением рН раствора от 5 до 9 летучесть общего йода снижается на порядок. При увеличении температуры в диапазоне от 40 до 90 °С летучесть увеличивается примерно в два раза. При этом летучесть НОI оказывается сравнимой с летучестью I_2 и должна учитываться не только при высоких значениях рН, когда НОI является единственной молекулярной формой йода в растворе, но и в диапазоне рН от 6 до 8.

исследование распространения продуктов деления в
окружающей среде при запроектных авариях

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ ПРИ ЗАПРОЕКТНЫХ АВАРИЯХ

О.В. Яковлева, Ю.Б. Шмельков

НИЦ Курчатовский Институт, Yakovleva_OV@nrcki.ru
Национальный исследовательский университет "МЭИ",
YakovlevaOV@mpei.ru

Одной из задач обоснования безопасности работы АЭС является анализ возможных сценариев тяжелых запроектных аварий с точки зрения выхода радиоактивных продуктов деления (ПД) в окружающую среду. Для оценки радиационных последствий аварии необходимо определить концентрацию ПД в конкретной точке местности, а также возможную дозу облучения людей на территории загрязнения для планирования мероприятий по защите населения.

Целью данной работы является разработка программного средства (ПС) МАП-ТА для оценки концентрации загрязняющих веществ после выброса их в окружающую среду и оценки дозовой нагрузки на население. Выполнены кросс-верификационные расчеты и сравнение их с результатами расчета других ПС, которые показали хорошую качественную сходимость. Также выполнены расчёты и проведено сравнение с экспериментальными результатами [1]. Лучшая сходимость наблюдается у результатов, в расчетах которых скорость принималась минимальной – 5 м/с, результаты представлены на рис. 1.

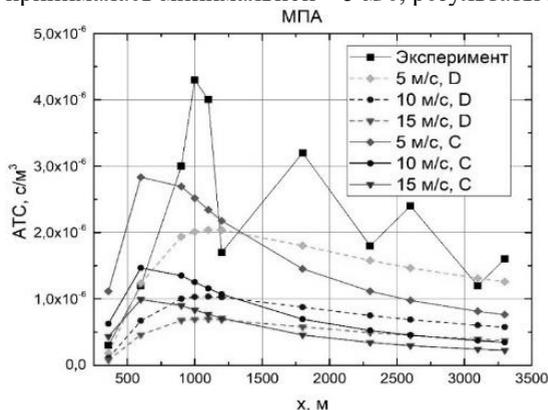


Рис. 1. Сравнение экспериментальных данных и расчетов кода МАП-ТА

Литература.

1. A.A. Denis Maro, Transfert des radionucléides sous forme de gaz et d'aérosols dans les environnements complexes, ISBN 987-2-9545237-0-5 (2013).