

Сборник тезисов докладов
XXIII межвузовской молодежной научной
школы-конференции имени Б. С. Ишханова

**Концентрированные потоки энергии
в космической технике, электронике,
экологии и медицине**

23–24 ноября 2022 года
НИИЯФ МГУ, Москва

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
ИМЕНИ Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

**XXIII МЕЖВУЗОВСКОЙ МОЛОДЕЖНОЙ
НАУЧНОЙ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ
ИМЕНИ Б. С. ИШХАНОВА**

**«КОНЦЕНТРИРОВАННЫЕ ПОТОКИ ЭНЕРГИИ
В КОСМИЧЕСКОЙ ТЕХНИКЕ
ЭЛЕКТРОНИКЕ, ЭКОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ»**

23-24 ноября 2022 г.

Москва
2023

УДК 539.12.01(063)
ББК 22.383
Т78

Сборник тезисов докладов XXIII Межвузовской молодежной научной школы-конференции «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине». / Под ред. А.А. Кузнецова. Издание подготовил к печати Д.В. Лосев. – М.: «КДУ», 2023. – 103 с.: табл., ил.

ISBN 978-5-91-304-....
DOI
РИНЦ

В трудах школы рассмотрены физические основы концентрированных потоков энергии и их воздействия на материалы и изделия космической техники, методы обработки материалов концентрированным излучением, воздействие лазерного и микроволнового излучения на вещество, концентрированные потоки энергии в экологии и медицине, в электронике, проблемы физики нейтрино и ядерной спектроскопии.

УДК 539.12.01(063)
ББК 22.383

© Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, 2023
© НИИЯФ МГУ, 2023
© «КДУ», 2023

СОДЕРЖАНИЕ

Воздействие ионизирующих излучений на материалы и космическую технику

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>К.В. Львов, С.Ю. Стремоухов.</i> Повышение эффективности преобразования излучения компактного ик источника в коротковолновую область спектра при взаимодействии с газовыми и конденсированными средами..... | 6 |
| <i>С.Ю. Толстиков.</i> Инженерная методика расчёта объемного заряжения изоляции проводов космического применения..... | 9 |
| <i>В.В. Валиуллин, А.Б. Надирадзе.</i> Конденсаторная модель кинетики формирования поверхностного заряда в диэлектрике | 11 |
| <i>И.Р. Муллахметов.</i> Радиационная электропроводимость полистирола при низкой температуре | 13 |
| <i>А.М. Шамаев.</i> Деградация материала ЭКОМ-1 при электронном облучении..... | 14 |
| <i>С.П. Никитин.</i> Исследование перераспределения натрия в стекле К-208 при протонном облучении..... | 16 |
| <i>А.А. Бурцев, А.В. Киселев, Н.Н. Елисеев, В.В. Ионин, В.А. Михалевский, А.А. Невзоров, А.А. Лотин.</i> Перестраиваемые оптические системы на основе тонких пленок фазоизменяемых материалов | 18 |
| <i>Н.Н. Елисеев, А.А. Бурцев, В.А. Михалевский, А.В. Киселев, В.В. Ионин, А.А. Невзоров, В.В. Гребнев, А.А. Лотин.</i> Температурная динамика физических свойств тонких плёнок фазоизменяемых материалов | 20 |
| <i>А.В. Киселев, А.А. Бурцев, В.В. Ионин, В.А. Михалевский, Н.Н. Елисеев, А.А. Невзоров, А.А. Лотин.</i> Светоиндуцированная модуляция тонких плёнок халькогенидных материалов импульсным лазерным излучением..... | 22 |
| <i>В.А. Михалевский, А.А. Невзоров, М.Д. Хоменко, А.А. Бурцев, А.В. Киселев, Н.Н. Елисеев, В.В. Ионин, А.А. Лотин.</i> Термокинетическая модель фазовых переходов в тонких пленках халькогенидных материалов | 24 |
| <i>В.А. Басов.</i> Исследование электростатических разрядов при облучении элементов терморегулирующих покрытий радиаторов космических аппаратов..... | 26 |
| <i>И.Б. Винтайкин.</i> К исследованию потери массы терморегулирующих покрытий космических аппаратов при облучении в вакууме | 28 |
| <i>Ю.В. Балакшин, Д.К. Миннебаев, А.А. Шемухин, О.М. Марченко, А.Д. Шпорин.</i> Формирование дефектов в двумерных наноструктурах на основе углерода под действием ионного облучения..... | 30 |
| <i>Д.С. Киреев, А.Е. Иешкин, Д.Р. Бессмертный, И.Н. Кутлусурин.</i> Электронная ионная эмиссия с поверхности металлов при облучении кластерными ионами..... | 32 |
| <i>О.М. Марченко, А.П. Яковлев, Д.К. Миннебаев, А.А. Шемухин, А.С. Ерофеев, П.В. Горелкин.</i> Создание микрорельефа для улучшения адгезии клеток НЕК-293 на поверхности ПДМС с помощью пучка ионов аргона..... | 34 |
| <i>А.А. Соловых, А.А. Сычева, Е.В. Воронина.</i> Механизмы взаимодействия атомов и ионов Ar и He низкой энергии с метильными группами на поверхности LOW-K диэлектриков..... | 36 |

Радиационные технологии. Синхротронные, нейтронные и ядерно-физические методы диагностики и модифицирования материалов

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>О.В. Градов.</i> От радиохимического и ядерно-химического управления (авто)колебательными реакциями к ядерно-химическим аналоговым вычислениям и нейроморфным структурам, чувствительным к облучению элементарными частицами | 38 |
| <i>А.В. Андреев, Н.А. Фёдоров.</i> Моделирование установки для исследования углерода в почве | 40 |
| <i>Ю.А. Тетерин, Т.В. Плахова, Р.Д. Светогоров, А.Л. Тригуб, А.Ю. Романчук, С.Н. Калмыков.</i> Структурные особенности диоксида и фосфата тория, полученных методами мягкой химии | 42 |
| <i>М.М. Попова, Е.В. Грызлова, С.Н. Юдин, М.Д. Киселев, А.Н. Грум-Гржимайло.</i> Исследование эволюции состояния квантовых систем в поле синхротронного излучения: параметры анизотропии фотоэлектронных спектров | 43 |
| <i>М.Д. Киселев, А.Н. Грум-Гржимайло.</i> Моделирование взаимодействия закрученного излучения с атомом гелия в области низших автоионизационных состояний | 45 |
| <i>Е.В. Грызлова, М.М. Попова, С.Н. Юдин, М.Д. Киселев, А.Н. Грум-Гржимайло.</i> Конкуренция фотоионизационных и релаксационных процессов в малых квантовых системах под действием синхротронного излучения | 47 |
| <i>А.С. Кузенкова, А.Ю. Романчук, Р.Д. Светогоров, А.Л. Тригуб, С.Н. Калмыков.</i> Применение синхротронных методов для изучения окислительно-восстановительного поведения $Pu(VI)$ | 49 |
| <i>Р.И. Воронин, М.Д. Хоменко.</i> Влияние температуры подложки на процесс лазерного нанесения функционально градиентных композитных покрытий Inconel625/WC | 51 |
| <i>А.Н. Черников, В.Д. Жакетов, К. Храмко, Ю.Н. Хайдуков, А.П. Буздавин, А.В. Петренко, Ю.В. Никитенко.</i> Разработка криостата для низкотемпературных исследований на рефлектометре поляризованных нейтронов РЕМУР | 53 |
| <i>Ю.А. Алехина, Е.А. Фадеев, Е.М. Ибрагимова, О.К. Кувандиков, М.К. Салахитдинова, А.Б. Грановский, Н.С. Перов.</i> Магнитные свойства наночастиц оксидов железа в матрице калиево-алюмооборатных стекол, подверженных терморадикационному воздействию | 54 |
| <i>А.И. Шилов, Е.О. Рахманов, К.С. Перваков, И.В. Морозов.</i> Висмутиды — аналоги железосодержащих сверхпроводников семейства 122 | 56 |
| <i>Ф.Д. Федюнин, Д.А. Спасский, А.В. Спасский, Н.С. Козлова, Е.В. Забелина, В.М. Касимова, О.А. Бузанов.</i> Влияние облучения протонами на оптические свойства монокристаллов гранатов $Gd_3Al_xGa_{(5-x)}O_{12}(x=0,1,2,3)$ | 58 |
| <i>А.Д. Завильгельский, А.В. Назаров, Ю.В. Балакишин, А.А. Шемухин, А.Д. Шпорин.</i> Компьютерное моделирование влияния ионизирующего излучения на поликристаллы вольфрама | 60 |

Медицинская физика и радиационная биология

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Н.А. Аристова, И.П. Иванова, И.М. Пискарев, В.А. Ушканов.</i> Нитрование фенола водой, активированной импульсным излучением горячей плазмы | 61 |
| <i>И.Т. Межетьева, У.А. Близнюк, П.Ю. Борщеговская, Е.К. Козлова, О.Е. Гудкова.</i> Исследование спектров гемоглобина в образцах мяса говядины после воздействия ускоренными электронами | 63 |
| <i>В.С. Иванцова, У.А. Близнюк, П.Ю. Борщеговская, В.С. Ипатова, З.К. Никитина, И.К. Гордонова, А.П. Черняев, Д.С. Юров.</i> Радиочувствительность бактерий <i>ESCHERICHIA COLI</i> при различных начальных концентрациях | 65 |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>И.Ф. Жаринов, А.Н. Сустатова, А.А. Щербаков, А.П. Черняев.</i> Распределение вторичных частиц в тканеэквивалентных средах | 68 |
| <i>Е.А. Новикова, И.И. Банникова, В.В. Костюченко, Е.Н. Лыкова, А.П. Черняев.</i> Дозиметрическое сравнение планов лечения при автоматическом и ручном планировании в системе LEKSELL GAMMA PLAN..... | 70 |
| <i>У.А. Близнюк, П.Ю. Борщеговская, А.В. Браун, В.С. Ипатова, А.Д. Никитченко, И.А. Родин, О.Ю. Хмелевский, А.П. Черняев, Д.С. Юров.</i> Воздействие ускоренных электронов с энергией 1 МэВ на белок бычий сывороточный альбумин | 72 |
| <i>Н.Д. Кречетов, С.А. Золотов, Ф.Р. Студеникин, А.П. Черняев, С.А. Соколов, У.А. Близнюк, П.Ю. Борщеговская.</i> Компьютерное моделирование стереотаксического облучения мозга с использованием радиоизотопа ⁶⁰ Со | 74 |
| <i>С.А. Соколов, С.А. Золотов, Ф.Р. Студеникин, Н.Д. Кречетов, А.П. Черняев, У.А. Близнюк, П.Ю. Борщеговская, Д.С. Юров.</i> Дозиметрическое планирование облучения биообъектов на ускорителе УЭЛР-1-25-Т-001 | 76 |
| <i>Ф.А. Расулова, Р.А. Алиев, С.С. Бельшев, А.А. Кузнецов, В.В. Ханкин, Н.Ю. Фурсова.</i> Фотонейтронные реакции в природной смеси селена..... | 78 |
| <i>Я.В. Зубрицкая, У.А. Близнюк, М.К. Белемишев, П.Ю. Борщеговская, В.М. Авдюхина, Т.А. Болотник, И.А. Родин, А.П. Черняев.</i> Оценка перспективы применения методов «отпечатков пальцев» для идентификации картофеля, прошедшего обработку рентгеновским излучением | 80 |
| <i>К.А. Помозова, А.П. Черняев, Г.Е. Горлачев, А.В. Голанов.</i> Диффузионно-взвешенные изображения: моделирование и обработка для диагностики и радиотерапии внутричерепных мишеней..... | 82 |
| Ядерная физика, физика высоких энергий | |
| <i>Д.А. Мяжков, С.В. Петрушанко.</i> А-зависимость эллиптического и триангулярного потоков заряженных частиц в релятивистских столкновениях тяжелых ядер в модели HYDJET++ и эксперименте CMS (LHC) | 84 |
| <i>Б.А. Фадеенко, Л.Н. Смирнова.</i> Изучение рождения трёх W бозонов в pp соударениях при энергии 13 ТэВ на базе данных ATLAS OPEN DATA..... | 86 |
| <i>В.О. Нестеренко, М.А. Мардыбан, П.-Г. Рейнхард, А. Репко.</i> Поведение момента инерции в сильно деформированных ядрах ²⁴ Mg и ²⁰ Ne | 87 |
| <i>Е.В. Мардыбан, Е.А. Колганова, Т.М. Шнейдман, Р.В. Джолос.</i> Эволюция коллективного потенциала в цепочке изотопов Zr | 88 |
| <i>В. Барышников, В. Бабкин, С. Бузин, А. Бурдыко, М. Буряков, В. Головатюк, А. Дмитриев, П. Дулов, М. Румянцев, С. Ромахов, Т. Смолянин, В. Дроник, Е. Киданова, А. Пятигор.</i> Статус времяпролетной системы TOF эксперимента MPD на коллайдере NICA | 90 |
| <i>А.П. Ивлева, Т.Ю. Третьякова.</i> Массовые соотношения для предсказания масс ядер..... | 92 |
| <i>Д.Ф. Байрамов, Т.Ю. Третьякова.</i> Предсказание периодов полураспада сверхтяжелых элементов | 94 |
| <i>М.А. Стриж.</i> Анализ событий взаимодействия антинейтрино в детекторе iDREAM | 96 |
| <i>Г.В. Пампушик, Н.А. Фёдоров, Т.Ю. Третьякова.</i> Развитие библиотеки TALYSLIB..... | 97 |
| Алфавитный указатель авторов..... | 99 |

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ КОМПАКТНОГО ИК ИСТОЧНИКА В КОРОТКОВОЛНОВУЮ ОБЛАСТЬ СПЕКТРА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ГАЗОВЫМИ И КОНДЕНСИРОВАННЫМИ СРЕДАМИ

К. В. Львов¹, С. Ю. Стремоухов^{1,2}

¹*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,*

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

E-mail: lvov.kv14@physics.msu.ru

Излучение видимого, ультрафиолетового и рентгеновского диапазонов активно применяется для изучения и диагностики различных материалов. Разработано множество методов исследования структуры вещества с использованием рентгеновского излучения [1], двухфотонная флуоресцентная спектроскопия [2], КАРС-спектроскопия [3], нелинейно-оптические методы диагностики поверхности полупроводников и металлов [4] и диагностики плазмы [5, 6]. К настоящему времени доступными стали исследования с высоким временным разрешением за счет создания установок, генерирующих ультракороткие (фемтосекундные) импульсы. К таким установкам относятся оптические лазеры и лазеры на свободных электронах (ЛСЭ). ЛСЭ, генерирующие в первую очередь, рентгеновское излучение, являются установками класса «мегасайенс», проведение исследований на таких уникальных установках требует длительного горизонта планирования.

Вместе с тем, для проведения предварительных исследований образцов, а также для отработки методик диагностики материалов могут быть полезными существенно менее яркие, но компактные («table-top») источники ультракороткого когерентного излучения, основанные на нелинейно-оптическом преобразовании лазерного излучения в коротковолновую область при взаимодействии с газовыми и конденсированными средами [7]. Для получения коротковолнового излучения в экспериментальных «table-top» установках, как правило, используется нелинейное умножение частоты источника накачки, т.е. генерация гармоник низкого и высокого порядков. Применение источников среднего инфракрасного диапазона в качестве накачки позволяет как увеличить эффективность генерации гармоник низкого порядка (благодаря малой фазовой расстройке между накачкой и низкими гармониками), так и существенно обогатить спектр высоких гармоник, т.к. частота отсечки пропорциональна квадрату длины волны [8]. Увеличение эффективности генерации излучения таких установок является важным этапом на пути их использования для проведения предварительных исследований веществ. Некоторые способы увеличения эффективности генерации гармоник низкого и высокого порядков рассматриваются в данной работе.

Генерация гармоник низкого порядка в диэлектриках при воздействии на них лазерного излучения ближнего и среднего инфракрасного диапазонов сопровождается образованием суперконтинуума с ярко выраженным окончанием на границе ультрафиолетовой и видимой области спектра [9]. Положение границы генерируемого излучения, называемое анти-стоксовым крылом (АСК) суперконтинуума, определяется дисперсионным соотношением и вызвано интерференцией излучения от источников, расположенных на оси распространения импульса. Одним из возможных способов управления спектром суперконтинуума и положением АСК является внешняя фокусировка. Как было выяснено, более жесткая фокусировка приводит к генерации большей плотности свободных носителей и существенному искажению дисперсионного

соотношения, определяющего положение АСК, в результате чего его максимум смещается в длинноволновую область (рис. 1а).

Одним из способов увеличения эффективности генерации гармоник высокого порядка в протяженных газовых средах является применение эффекта квази-фазового согласования. Для этого лазерное излучение пропускается через среду, представляющую собой набор газовых струй. Теоретическое исследование [10] генерации гармоник высокого порядка в таких средах показало (рис. 1б, 1в), что эффективность этого процесса увеличивается обратно толщине d газовых струй как $\sim d^{-1.5}$. Кроме того, изменяя толщину газовых струй, можно селективно усиливать гармоники, для которых когерентная длина совпадает с толщиной газовых струй. Поразительным результатом является увеличение эффективности генерации, пропорциональное квадрату длины волны лазерного излучения $\sim \lambda^2$. Таким образом, квази-фазовое согласование позволяет частично компенсировать уменьшение эффективности генерации когерентного излучения при переносе излучения накачки в средний инфракрасный диапазон ($\sim \lambda^{-5.5}$ [11]).

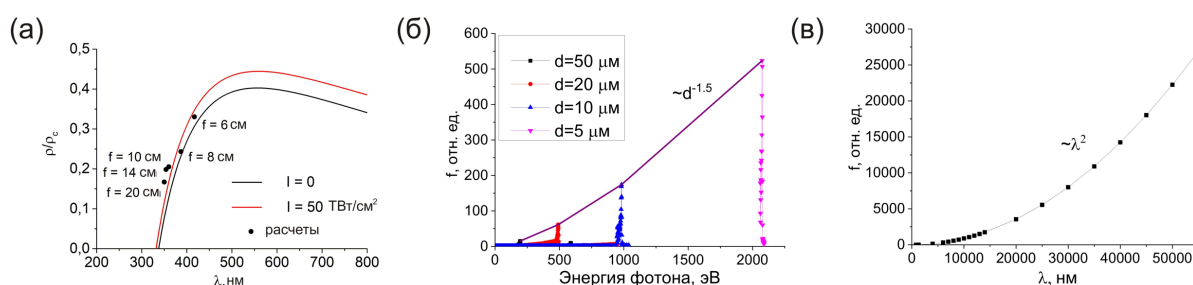


Рис. 1. (а) Плотность генерируемых свободных носителей в зависимости от положения АСК, рассчитанного по дисперсионному соотношению [9]. Черными точками показаны результаты моделирования для различных фокусных расстояний f . Расчеты проведены для лазерного излучения на длине волны 4400 нм длительности 200 фс, распространяющегося в CaF_2 . (б) Распределение эффективности усиления гармоник по спектру, вычисленное для нескольких значений ширины аргоновых газовых струй 50 мкм (черная кривая с квадратами), 20 мкм (красная кривая с кружками), 10 мкм (синяя кривая с треугольниками) и 5 мкм (розовая кривая с перевернутыми треугольниками). Расчеты проводились для двухчастотного лазерного поля, образованного первой ($I_{\omega} \sim 10^{14}$ Вт см^{-2}) и второй ($I_{2\omega} \sim 10^{13}$ Вт см^{-2}) гармониками Ti:Sa лазера длительности 30 фс и для давления $p=230$ мбар. (в) Зависимость эффективности усиления гармоники с энергией фотона ~ 196 эВ от длины волны. Расчеты проводились для двухчастотного лазерного поля, образованного первой ($I_{\omega} \sim 10^{14}$ Вт см^{-2}) и второй ($I_{2\omega} \sim 10^{13}$ Вт см^{-2}) гармониками лазера, длительности импульсов соответствовали 12 осцилляциям поля на основной частоте лазера, при фиксированном значении ширины аргоновых газовых струй $d=50$ мкм и давления в них $p=230$ мбар.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2021-1353). Львов К.В. является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

1. T. Pfeifer et al. Femtosecond x-ray science // Reports Prog. Phys. 2006, Vol. 69, P. 443.
2. H.F. Dobe. Generation of coherent VUV radiation and its application to plasma diagnostics // Plasma Sources Sci. Technol. 1995, Vol. 4, P. 224–233.
3. S.A. Akhmanov and N.I. Koroteev. Nonlinear optical methods in light scattering spectroscopy. // Moscow, Russia: Nauka, 1981.
4. S.A. Akhmanov et al. Interaction of powerful laser radiation with the surfaces of semiconductors and metals: nonlinear optical effects and nonlinear optical diagnostics // Sov. Phys. Usp. 1985, Vol. 28, P. 1084.
5. V.N. Ochkin et al. Nonlinear optical techniques for plasma diagnostics // IEEE Transactions on plasma science 1998, Vol. 26, No. 5, P. 1502-1513.

6. E.I. Mareev et al. Ultrafast third harmonic generation imaging of microplasma at the threshold of laser-induced plasma formation in solids // *Appl. Phys. Lett.* 2019, Vol. 114, P. 031106.
7. I.A. Kamenskikh et al. Decay kinetics of CeF₃ under vuv and x-ray synchrotron radiation // *Symmetry* 2020, Vol. 12, P. 914.
8. T. Popmintchev et al. Bright coherent ultrahigh harmonics in the keV X-ray regime from mid-infrared femtosecond lasers // *Science* 2012, Vol. 336, P. 1287–1291.
9. K. Lvov et al. The role of external focusing in spectral enrichment under mid-IR laser filamentation in dielectrics // *J. Opt.* 2021, Vol. 23, P. 065502.
10. S. Stremoukhov. Quasi-phase matching of high harmonics driven by mid-IR: toward the efficiency drop compensation // *JOSA B* 2022, Vol. 39, P. 1203-1208.
11. J. Tate et al. Scaling of wave-packet dynamics in an intense midinfrared field // *Phys. Rev. Lett.* 2007, Vol. 98, P. 013901.

ИНЖЕНЕРНАЯ МЕТОДИКА РАСЧЁТА ОБЪЕМНОГО ЗАРЯЖЕНИЯ ИЗОЛЯЦИИ ПРОВОДОВ КОСМИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

С. Ю. Толстиков

Аспирантская школа по Техническим наукам,
НИУ ВШЭ, Москва, Россия

E-mail: stolstikov@hse.ru

Проблема объемного заряжения космических аппаратов (КА) работающих на геостационарной орбите и высокоэллиптических орбитах по-прежнему является актуальной [1,2]. Наши исследования посвящены проблеме внутреннего заряжения полимерных материалов КА. В частности, мы рассматриваем диэлектрическую изоляцию проводов, проложенных по КА. Диэлектрики могут накапливать и хранить объемный заряд длительное время. При проектировании КА рекомендуется подбирать диэлектрические материалы с удельной электропроводностью от 10^{-9} до 10^{-11} Ом $^{-1}$ м $^{-1}$, что способствует быстрой релаксации объемного заряда и позволяет избежать возникновения электрических полей способных привести к возникновению электростатических разрядов [3]. Однако, следует учитывать, что электропроводность может уменьшиться, из-за понижения температуры [4] или, согласно исследованиям, выполненным в натуральных условиях на аппарате «CRESS», из-за длительного нахождения в вакууме [5].

В то же время не существует методики подбора оптимальной толщины диэлектрической изоляции проводов. Предложенная нами инженерная методика позволяет производить расчёты в специальном программном обеспечении (ПО) (рис. 1) [6]. С помощью предлагаемой методики рассчитывается максимальная напряженность электрического поля в диэлектрическом слое провода для конкретного образца.

Программа для ЭВМ №2021669525

| | | | |
|----------|---------------------------------------|------------------------|---------|
| Образец | Радиус жилы (R1): | 0.16 | мм |
| | Толщина диэл. слоя, начальная(R2-R1): | 0.1 | мм |
| | Шаг: | 50 | |
| | Толщина диэл. слоя, конечная(R2-R1): | 1 | мм |
| Материал | Темновая проводимость (Yt): | 1 * 10 ⁻¹⁶ | Ом-1м-1 |
| | Плотность потока электронов: | 0.9 * 10 ⁻⁹ | А/м2 |
| Среда | Инжекция электронов (So): | -6 * 10 ⁻⁶ | А/м3 |
| | Рассчитать | | |

Рис. 1. Основные параметры образца провода необходимые для расчета максимального электрического поля в диэлектрической изоляции по предлагаемой методике.

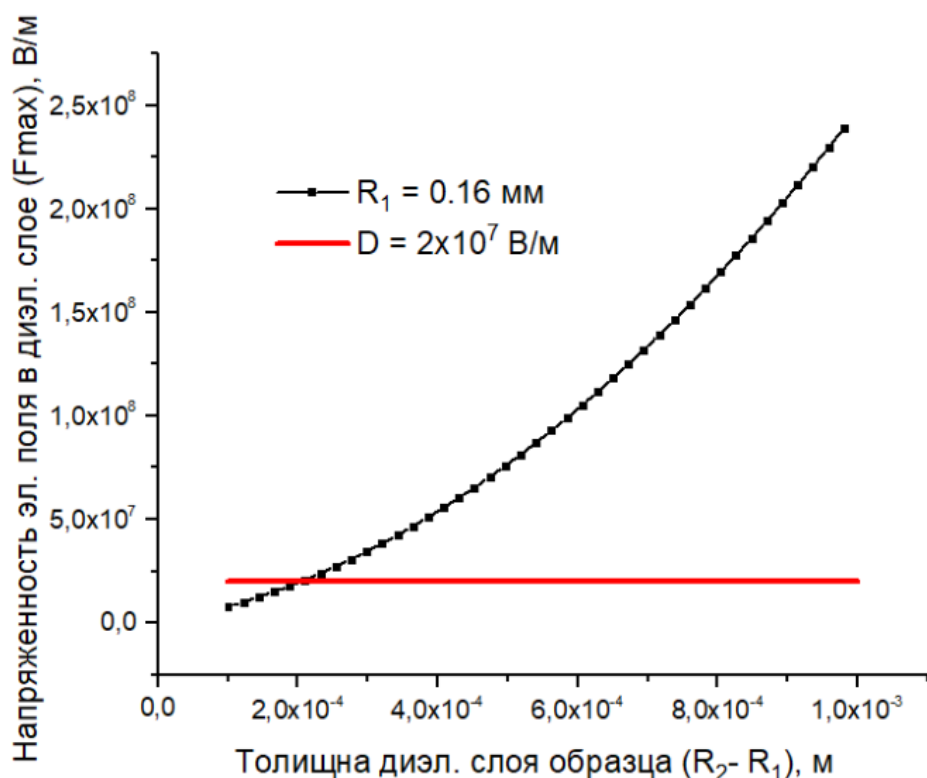


Рис. 2. Результат расчета максимального электрического поля в диэлектрической изоляции для образца провода по предлагаемой методике.

Согласно работе [3] значение напряженности поля не должно превышать $2 \cdot 10^7$ В/м, начиная с которого возможен объемный пробой (рис. 2). Относительного данного значения предлагается отбирать для использования или продолжать подбор образцов с более подходящими характеристиками диэлектрической изоляции.

1. J. Brunson, JR Dennison Hopping Conductivity in Low-Density Polyethylene // Proceedings of the 12th Rocky Mountain NASA Space Grant Consortium NASA Fellowship Symposium. – 2007
2. M. Soria-Santacruz, Introductory Tutorial Spacecraft Charging Technology Conference, 23 June 2014, Pasadena, USA.
3. NASA-Technical Handbook: Mitigating in-Space Charging Effects — A Guideline, document Rec. NASA-HDBK-4002A, Mar. 2011
4. V.S. Saenko, A.P. Tyutnev, M.A. Afanasyeva, A.E. Abrameshin. Spacecraft Internal Charging Simulation of the Electronics Device Plastic Cases // IEEE Transactions on Plasma Science. 2019. Vol. 47. No. 8.
5. R. Frederickson, “Electric discharge pulses in irradiated solid dielectrics in space,” IEEE Trans. Elect. Insul., vol. EI-18, no. 3, pp. 337–349, Jun. 1983.
6. С. Ю. Толстикова, Программное обеспечение «Программа для расчёта максимального электрического поля на диэлектрическом слое провода», Свидетельство о Государственной регистрации программы для ЭВМ №2021669525

КОНДЕНСАТОРНАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИКЕ

В. В. Валиуллин, А. Б. Надирадзе

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Институт №2 «Авиационные, ракетные двигатели и энергетические установки»,
Москва, Россия,*

E-mail: valeryvv1304@gmail.com

На высоких околоземных орбитах космический аппарат (КА) подвержен электризации магнитосферной плазмой [1]. Электризация или зарядка внешних поверхностей конструкции КА негативно сказывается на надежности аппарата. Следствиями такого воздействия на КА являются возникновение электростатических разрядов (ЭСР) и инициирование вторичных дуг на солнечных батареях (БС).

Другим, особенно нежелательным фактором, является появление низкотемпературной плазмы электроракетного двигателя (ЭРД) в области высоковольтного оборудования. Наличие плазмы вблизи контактов БС может стать причиной значительных токов утечек или электрических разрядов.

Мало изученной областью является релаксация заряда радиационно-заряженного диэлектрика в магнитосферной плазме под действием низкотемпературной плазмы ЭРД. Показано, что электрический потенциал поверхности диэлектрика снижается практически мгновенно. Однако остается вопрос, что происходит с зарядом в объеме диэлектрика после снятия потенциала. Поэтому необходимо системное исследование кинетики формирования поверхностного заряда при процессах зарядки и релаксации заряженного диэлектрика.

Радиационное накопление электронов в диэлектрике происходит на ловушках в дислокациях кристаллической решетки на глубине порядка нескольких десятков мкм от поверхности [2,3]. Образуется отрицательно заряженный слой электронов. По мере накопления заряда неупругоотраженные электроны участвуют в образовании вторичной электронной эмиссии из приповерхностного слоя. Эмиссия электронов приводит к образованию положительно заряженного слоя дырок на глубине нескольких атомных слоев. Аналогичный слой дырок образуется после появления ионно-электронной эмиссии при релаксации накопленного заряда ионами низкотемпературной плазмы.

В данной работе рассмотрена упрощенная конденсаторная математическая модель с обкладками в виде слоев электронов и дырок для описания кинетики формирования поверхностного заряда в диэлектрике. Данная математическая модель в виде системы дифференциальных уравнений описывает изменения концентрации заряженных частиц на обкладках конденсатора на основе баланса протекающих токов. В баланс токов включены: токи генерации носителей заряда, токи захвата зарядов на ловушки и освобождения их из них по механизму Пула-Френкеля, токи рекомбинации зарядов, дошедших до противоположно заряженного слоя, и токи проводимости зарядов, зависящие от напряженности электрического поля в диэлектрике.

Модель зарядки диэлектрика в рамках конденсаторной модели включает две стадии установления параметров электризации. Сначала устанавливается ток вторичной электронной эмиссии, а далее, с промежутком времени потенциал поверхности диэлектрика. При протекании первой стадии зарядки увеличивается коэффициент вторичной электронной эмиссии по причине возрастания тока вторичной электронной эмиссии. Следующая стадия характеризуется снижением тока вторичной электронной эмиссии и удержанием коэффициента вторичной электронной эмиссии на уровне единицы. Причинами возникновения данных эффектов являются изменения внутреннего и внешнего напряженностей электрического поля, соответственно.

Модель релаксации заряда диэлектрика низкотемпературной плазмой в рамках конденсаторной модели включает модели: вытягивания ионов из низкотемпературной плазмы, взаимодействия ионов с заряженной поверхностью и кинетики формирования поверхностного заряда в диэлектрике. Численный расчет релаксации заряда в момент появления плазмы над поверхностью диэлектрика показал кратковременное увеличение напряженности электрического поля, но недостаточное для возникновения пробоя диэлектрика. Электрический потенциал поверхности уменьшился до нулевого значения практически мгновенно. Однако заряды и напряженность электрического поля внутри диэлектрика могут сохраняться на длительное время.

Таким образом, в данной работе разработана конденсаторная модель для описания процессов накопления и релаксации заряда в диэлектрике. Чередующиеся воздействия зарядки и релаксации накопленного заряда позволят описать картину формирования и изменения структуры поверхностного заряда в диэлектрических материалах в реальных условиях эксплуатации.

1. Новиков Л.С. и др. Электризация космических аппаратов в магнитосферной плазме. В кн.: Модель космоса, 8-е издание, т.2: Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. Под ред. Л.С. Новикова, –М.: Изд-во “Книжный дом Университет”, 2007, с.236–275.
2. Твердохлебов С.И., Тухфатуллин Т.А. Критическая (взрывная) электронная эмиссия из диэлектриков, индуцированная инжекцией плотного пучка электронов. Известия Томского политехнического университета, 2000. 300(3): 41-47.
3. Meyza X. Secondary electron emission and self-consistent charge transport and storage in bulk insulators: Application to alumina /X. Meyza [et al.] // J. Appl. Phys. – 2003. – V. 94. – P. 5384-5392.

РАДИАЦИОННАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛИСТИРОЛА ПРИ НИЗКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

И.Р. Муллахметов¹

¹ *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», аспирантская школа по техническим наукам*

E-mail: imullakhmetov@hse.ru

В настоящее время в литературе не представлены экспериментальные данные и их анализ по радиационной электропроводности (РЭ) полимерных материалов при непрерывном облучении (низкотемпературная РЭ при импульсном облучении описана в [1]).

В работе выполнен анализ полученных нами экспериментальных данных по РЭ полистирола (ПС) при температуре кипения жидкого азота при длительном (~1000 с) облучении. В ходе анализа подтверждена корректность модели Роуза-Фаулера-Вайсберга [1] при низких температурах. Показано, что при снижении температуры мгновенная компонента РЭ уменьшается, а задержанная компонента РЭ практически исчезает, при этом полный сигнал уменьшается в 40 раз в сравнении с комнатной температурой.

Чтобы оценить напряженность электрического поля и возможность возникновения электростатических разрядов в облучаемой части ПС воспользовались формулой [2]

$$\frac{dF}{dt} = \frac{h - R}{h\epsilon\epsilon_0} \{i_0 - [F(t)(\gamma_D + \gamma_R(t))]\},$$

где F – напряженность электрического поля, В·м⁻¹; t – время облучения, с; i_0 – плотность потока электронов, А·м⁻²; ϵ_0 – электрическая постоянная, Ф·м⁻¹; ϵ – относительная диэлектрическая постоянная; γ_D – величина темновой проводимости, ом⁻¹·м⁻¹; γ_R – радиационная проводимость, ом⁻¹·м⁻¹; R – пробег электрона, м; h – толщина полимера, м.

На рис. 1 показаны рассчитанные значения напряженности поля в ПС от времени облучения при 79 К и 298 К.

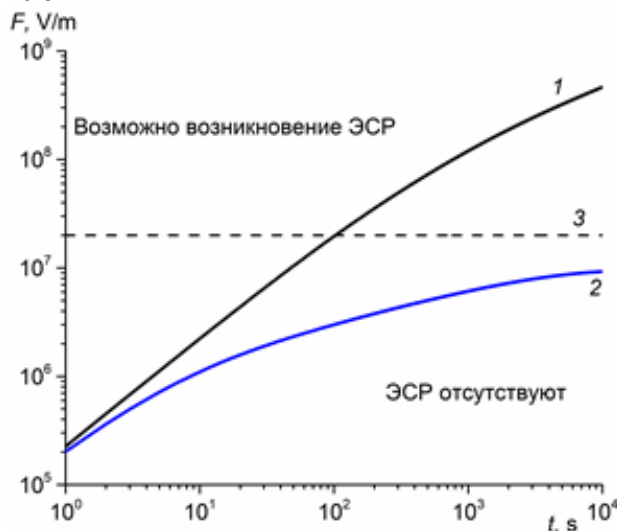


Рис. 1. Напряженность поля от времени облучения при 79 К (1) и 298 К (2). Пунктирной линией (3) показан уровень напряженности поля, при котором происходят электростатические разряды [3]. Плотность потока электронов (50 кЭв) 10^{-5} А·м⁻²

1. А.П. Тютнев, В.С. Саенко, Е.Д. Пожидаев, Н.С. Костюков. Диэлектрические свойства полимеров в полях ионизирующих излучений (Москва, Наука, 2005. с.453)
2. С.Р. Тумковский, И.Р. Муллахметов, Е.Д. Пожидаев, В.С. Саенко. Идентификация модели радиационной проводимости полимерных материалов // ИТ т. 28. № 5. (2022) с. 233–239.
3. NASA-Technical Handbook: Mitigating in-Space Charging Effects — A Guideline, document Rec. NASA-HDBK-4002B, Jul. 2022.

ДЕГРАДАЦИЯ МАТЕРИАЛА ЭКОМ-1 ПРИ ЭЛЕКТРОННОМ ОБЛУЧЕНИИ

А. М. Шамаев

Акционерное общество «Композит», г Королев Московской области

E-mail: hrizant28@rambler.ru

Воздействие ионизирующих излучений космического пространства на материалы внешних поверхностей космических аппаратов (КА) приводит к деградации их функциональных свойств. В частности, полимерные композиционные материалы используемые в качестве терморегулирующего покрытия КА подвергаются большим дозовым нагрузкам. В данной работе исследуется изменения спектрального коэффициента отражения образцов материала ЭКОМ-1 в результате серии из четырех этапов облучения в вакууме электронами с энергиями 40 кэВ и выдержки образцов между очередным радиационным воздействием в комнатных условиях. Эксперименты проводились с партией из 20 образцов которая была разбита на группы по 5 штук с максимально близкой толщиной покрытия на металлической подложке. В таблице 1 представлены значения флюенсов облучения на каждом этапе и суммарное значение флюенса после каждого этапа, а также значения коэффициента поглощения солнечного излучения A_s образца после каждого облучения.

Таблица 1. Значения флюенса облучения и коэффициента поглощения солнечного излучения

| № этапа | Значение флюенса $\Phi \times 10^{-15} \text{ см}^{-2}$ | | Значения A_s | Дата облучения |
|---------|---------------------------------------------------------|-----------|----------------|----------------|
| | На этапе | Суммарное | | |
| | | | 0,250 (исх.) | |
| 1 | 2,6 | 2,6 | 0,264 | 18.01.22 |
| 2 | 1,5 | 4,1 | 0,2711 | 29.06.22 |
| 3 | 1,5 | 5,6 | 0,2736 | 30.06.22 |
| 4 | 1,5 | 7,1 | 0,2769 | 12.07.22 |

На рис. 1 показан спектр отражения образца №17 перед первым этапом облучения. Измерения проводились на двулучевом спектрофотометре «Сару-500» с интегрирующей сферой DRA-CA-5500 с внутренним диаметром 150 мм, фотометрическая погрешность измерений спектрального коэффициента отражения – не более $\pm 0,02$.

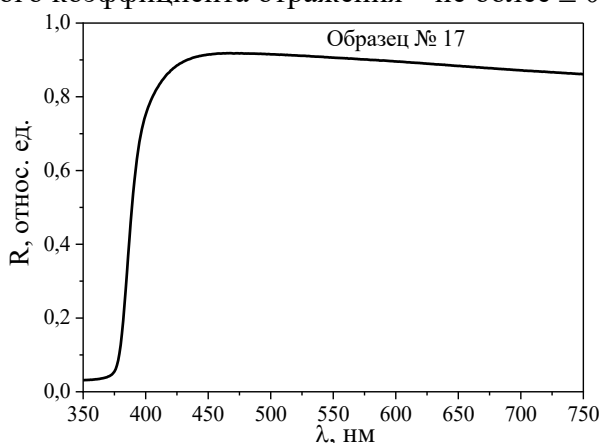


Рис.1. Исходный спектр коэффициента отражения образца ЭКОМ-1 №17

ЭКОМ-1 – это композиционный материал на основе акрилового сополимера, наполненного частицами ZnO, и поэтому одним из каналов его деградации, особенно при облучении частицами средних энергий является радиационно-стимулированное разложение молекулы ZnO. Облучения образцов проводилось в вакуумной камере 10^{-4} Па

и сразу после облучения проводилось измерение спектра отражения и определялось его изменение. На рис.2 представлены изменения спектрального коэффициента отражения в результате воздействия (черная линия) и после выдержки образца в течение 75 суток в комнатных условиях. Из этого рисунка видно, что после выдержки спектральный коэффициент отражения облученного образца частично восстановился, за счет процесса «отбеливания» на воздухе.

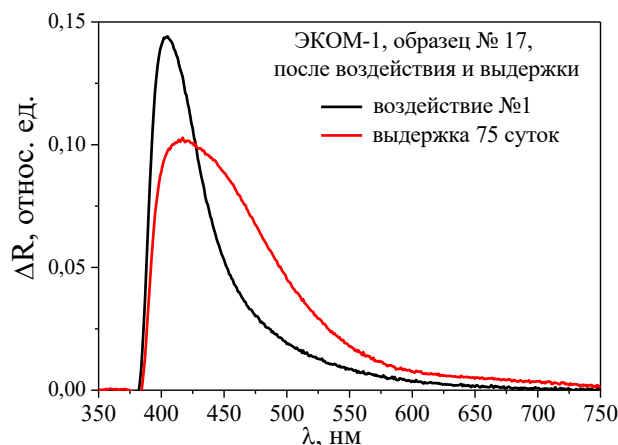


Рис.2. Изменение спектра коэффициента отражения образца ЭКОМ-1 №17 относительно исходного спектра после первого этапа облучения (черная линия) и после выдержки на воздухе (красная линия).

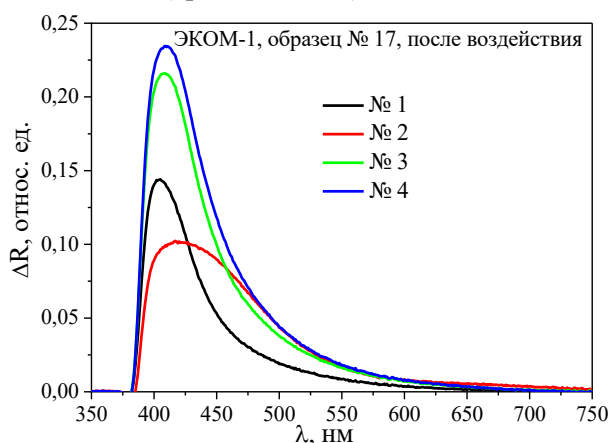


Рис.3. Изменение спектра коэффициента отражения образца ЭКОМ-1 №17 после 4 этапов облучения

Для интерпретации результатов экспериментов приводится элементарная модель накопления и отжига радиационных дефектов.

1. Модель космоса. Научно-информационное издание. Под ред. Л. С. Новикова. М.: КДУ, 2007.
2. Хасаншин Р.Х., Надирадзе А.Б. Изменение оптических свойств функциональных поверхностей космических аппаратов при совместном воздействии электронов и ультрафиолета // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2013, №3, с. 73-78.
3. Бреховских С. М., Викторова Ю. Н., Ланда Л. М. Радиационные эффекты в стеклах// Москва: Энергоиздат, 1982. – 182 с.
4. Mackey I.H., Smith H.L., Halperin A. Optical studies in X- irradiated high purity sodium silicate glasses// J. Phys. Chem. Sol. – 1996.–Vol. 27, №11– P. 1759–1772.
при облучении стекол К-208 и СМГ электронами с энергией в диапазоне от 10 до 40 кэВ.
// Перспективные материалы, 2015, №1, С. 22-30.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАТРИЯ В СТЕКЛЕ К-208 ПРИ ПРОТОННОМ ОБЛУЧЕНИИ

С. П. Никитин

¹Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана,
кафедра физики, Москва, Россия,

E-mail: norff@yandex.ru

Материалы, используемые на внешних поверхностях высокоорбитальных космических аппаратов (КА), подвергаются интенсивной воздействию потока заряженных частиц, основными компонентами которого являются электроны и протоны [1, 2]. Воздействие Поэтому применение диэлектрических материалов для изготовления КА связано с дополнительными трудностями, связанными с накоплением в них инжектированного заряда, который индуцирует поля высоких напряженностей, что не только приводит к развитию электростатических разрядов (ЭСР) [3, 4], но и стимулирует процессы перераспределения примесей в материале, что в свою очередь обуславливает изменение его структуры. В частности, воздействие электронов средних энергий на покровные стекла приводит к ЭСР с образованием на их поверхностях микровыступов и разрядных каналов (фигур Лихтенберга), образованию пузырьков O_2 , за счет перераспределения ионов щелочных металлов, приводящих к высвобождению немостиновых атомов кислорода и т.д. При облучении покровных стекол протонами средних энергий ЭСР не наблюдались, однако, как и в случае электронного облучения накопление в стекле заряда приводило к перераспределению в нем примесей и образованию газовых пузырьков, наполненных молекулами H_2 .

Облучение твердого тела может значительно повлиять на кинетику активационных процессов, таких как диффузия и десорбция, которые в основном и определяют изменения в нем концентрации примесных атомов. Радиационно-стимулированные процессы диффузии и десорбции часто объясняют влиянием колебательных возбуждений атомов на эти процессы. При воздействии на диэлектрические материалы электронов и протонов с энергиями характерными для магнитосферной плазмы непосредственно при взаимодействии частиц с атомами среды радиационные дефекты не образуются, они могут появиться при релаксации возбужденной излучением электронной подсистемы.

Эксперименты проводились с образцами стекла К-208, имеющего следующий состав (мол. %): SiO_2 (69.49); B_2O_3 (11.93); Al_2O_3 (4.00); K_2O (4.25); Na_2O (010.33); CeO_2 (2.00, сверх 100%). При этом электропроводность стекол К-208 определяется, в основном, содержанием в его составе оксида натрия. Это объясняется тем, что радиус ионов натрия Na^+ меньше, чем ионов калия K^+ , поэтому они являются более подвижными.

В наших экспериментах энергия протонов составляла 40 кэВ, и основная ее часть расходовалась на возбуждение электронной подсистемы вещества мишени. Поэтому, важную роль в радиационно-стимулированных кинетических процессах играет возбуждение электронной подсистемы стекла с последующим распадом электронных возбуждений и передачей их энергии атомной структуре [1]. Это, в свою очередь, приводит к отклонению функции распределения ионов по энергии колебаний, от функции описывающей случай термодинамически равновесного распределения. В частности, это способствует полевой миграции ионов натрия в облучаемом слое стекла.

В нашем случае радиационно-стимулированная миграция так же состоит в трансформации энергии электронного возбуждения в кинетическую энергию атомов. Необходимым условием такого преобразования является локализация возбуждения в приповерхностном слое с выделением энергии, превышающей энергию связи.

Поверхности образцов до и после облучения исследовались с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) Solver P47–Multi–Technique SPM в режиме полуконтактной атомно-силовой моды, которая при высокой точности измерений не разрушает поверхность. Измерения показали, что шероховатость поверхности образцов стекла, полученных вытягиванием через валки из разогретого стекла К-208 и последующей резки, не превышает 2 нм. Размеры образцов составляли 40×40×0,170 мм.

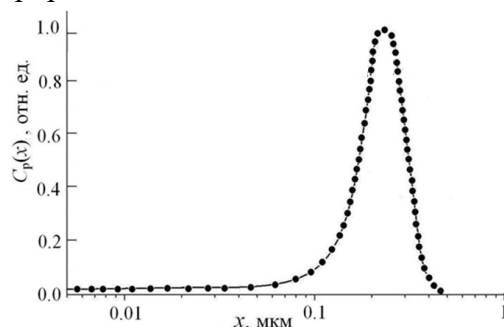


Рис.1. Распределение инжектированных протонов в облучаемом слое образца.

Несмотря на то, что глубина проникновения в образец К-208 протонов с энергией 40 кэВ не превышает 0,5 мкм (см. рис.1), поле инжектированного в стекло заряда влияет на перераспределение входящих в его состав ионов щелочных металлов, что, в свою очередь, играет ключевую роль в перестройке микроструктуры стекла и высвобождении атомов немостикового кислорода.

Наши эксперименты показали, что полевая миграция ионов щелочных металлов протекает по перколяционных каналам с их выходом на поверхность облучаемого образца. На рис. 2 демонстрируются АСМ-изображения облученных поверхностей образцов стекла, после воздействия на них протонов флюенсами $\Phi = 7,5 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$ (а) и $\Phi = 6,7 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$. Из анализа представленных изображений следует, что распределение перколяционных каналов по облученной поверхности и их размеры очень неравномерно.

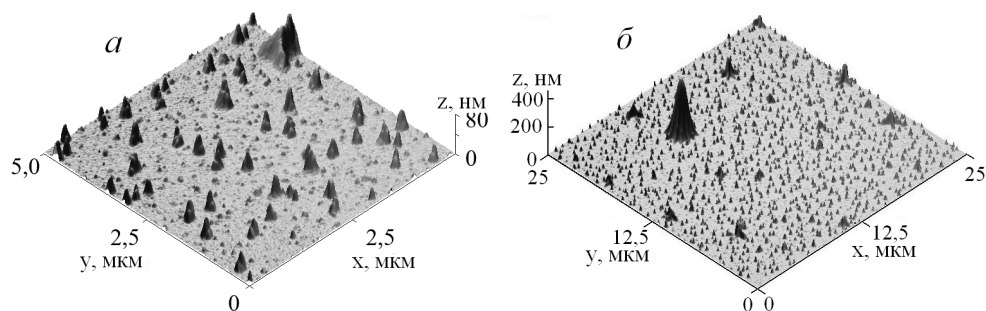


Рис. 2. 3D АСМ-изображения фрагментов поверхностей образцов облученных разными флюенсами

1. Модель космоса. Научно-информационное издание. Подред. Л. С.Новикова. М.: КДУ, 2007.
2. Ferguson D.C., Wimberly S.C. The Best GEO Daytime Spacecraft Charging Index. Proceed. 50th AIAA Aerospace Sci. Mtg. 2013.
3. Н. Fujii, Y. Shibuya, T. Abe [et al.] Research Activity in Mitsubishi Electricron Spacecraft Charging // Spacecraft and Rockets. 1988. Vol. 25, №. 2. P. 156.
4. Хасаншин Р.Х., Новиков Л.С., Гаценко Л.С., Волкова Я.Б. Электроразрядные процессы при облучении стекол К-208 и CMG электронами с энергией в диапазоне от 10 до 40 кэВ. // Перспективные материалы, 2015, №1, С. 22-30.

ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФАЗОИЗМЕНЯЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ

А. А. Бурцев, А. В. Киселев, Н. Н. Елисеев, В. В. Ионин, В. А. Михалевский,
А. А. Невзоров, А. А. Лотин

*Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, МО, Россия*

E-mail: murrkiss2009@yandex.ru

Фазоизменяемые материалы — это твердые тела, которые характеризуются уникальным сочетанием свойств. Они существуют в аморфной и кристаллической фазах с заметно различающимися оптическими и электрическими свойствами, вызванными необычным изменением структурного порядка, концентрации электронов и химической связи при кристаллизации [1, 2]. Можно изменить фазу такого материала за очень короткое время (наносекунды) и многократно между двумя фазами, что делает фазоизменяемые материалы идеальными кандидатами для хранения данных. Халькогенидные материалы (теллуриды GeTe , Sb_2Te_3 и их производные с различным стехиометрическим соотношением), широко используются в области создания модулей энергонезависимой памяти. Уникальным свойством данных ФИМ является возможность надежно и воспроизводимо переключать их оптические / электрические характеристики в течение миллиардов циклов переключения. Ранее был продемонстрирован высокий оптический контраст в спектральном диапазоне от 200 до 22000 нм и большая разница в электропроводности между аморфным и кристаллическим состояниями [3].

ФИМ используются в волоконной оптике уже почти три десятилетия. Однако только за последнее десятилетие в области интегрированной фотоники произошел значительный прогресс. В частности, благодаря распространению средств микро- и нанопроизводства стали возможными интегрированные волноводы и ряд фотонных устройств. Передача информации оптическими средствами весьма желательна из-за практически неограниченной полосы пропускания и возможности мультиплексирования [4]. Тем не менее, проблемы с остаточными перекрестными помехами и скоростью фотонов затрудняют их захват в компактном устройстве. Однако как вычислительные взаимодействия (то есть функции, выполняющие арифметические операции, например, в процессоре), так и хранение данных являются важными компонентами работающего оптического компьютера. Даже в краткосрочной перспективе ограничением для увеличения скорости вычислений является узкое место в передаче информации между памятью и процессором в так называемом компьютере фон Неймана [5]. Это представляет собой важное и очень актуальное приложение для объединения ФИМ с интегрированными оптическими схемами для сверхбыстрых встроенных оптических функций с малыми потерями. Материалы, используемые для интегрированной оптики, до сих пор в подавляющем большинстве случаев лишены возможности активной перестройки. Согласно многочисленным недавним демонстрациям, ФИМ превосходны как потенциальные кандидаты, когда они были соединены с нанофотонными схемами для создания оптических фильтров и элементов памяти [6, 7].

В данной работе приводятся результаты исследования многослойной структуры из нескольких слоев ФИМ [8] и системы управления оптическим сигналом на основе полимерного волновода с нанесенной тонкой (50 нм) пленкой ФИМ [9]. Полученные результаты демонстрируют перспективный путь создания новых устройств на основе тонких пленок халькогенидов, таких как многоуровневая память, оптические фильтры, полностью оптические логические элементы и их массивы, биоподобные оптико-электронные устройства [10, 11]. Ячейки многоуровневых состояний на основе халькогенидных сплавов обладают рядом принципиальных свойств, таких как пред-

пороговый режим накопления энергии, пороговое значение энергии перехода и нелинейное поведение при переключении состояний, что позволяет рассматривать работу как аналоги биологического нейрона [12]. Поскольку соотношение фаз контролируется оптическими методами (одновременно измеряются коэффициенты пропускания и отражения), приведенный метод позволяет достичь более высокой точности и стабильности всех программируемых состояний по сравнению с контролем электрофизическими методами (через удельную проводимость или сопротивление) [13, 14].

1. Wuttig M., Raoux S. The science and technology of phase change materials // *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 2012. Т. 638. №. 15. С. 2455-2465.
2. Козюхин С. А. и др. Материалы фазовой памяти и их применение // *Успехи химии*. – 2022. Т. 91. №. 9.
3. Eliseev N. N. et al. Wide range optical and electrical contrast modulation by laser-induced phase transitions in GeTe thin films // *Results in Physics*. 2020. Т. 19. С. 103466.
4. Wuttig M., Bhaskaran H., Taubner T. Phase-change materials for non-volatile photonic applications // *Nature photonics*. 2017. Т. 11. №. 8. С. 465-476.
5. Zhang W. et al. Designing crystallization in phase-change materials for universal memory and neuro-inspired computing // *Nature Reviews Materials*. 2019. Т. 4. №. 3. С. 150-168.
6. Sreekanth K. V. et al. *New Directions in Thin Film Nanophotonics*. Springer Singapore, 2019.
7. Rios C. et al. Integrated all-photonic non-volatile multi-level memory // *Nature photonics*. 2015. Т. 9. №. 11. С. 725-732.
8. Бурцев А. А. и др. Перестраиваемые многослойные структуры на основе тонких пленок фазоизменяемых материалов для среднего инфракрасного диапазона // *Тр. XXV Международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника»*. 2021. Т. 2. С. 80-81.
9. Ionin V. V. et al. An optical synapse based on a polymer waveguide with a GST₂₂₅ active layer // *Applied Physics Letters*. 2021. Т. 119. №. 8. С. 081105.
10. Wang L., Lu S. R., Wen J. Recent advances on neuromorphic systems using phase-change materials // *Nanoscale research letters*. 2017. Т. 12. №. 1. С. 1-22.
11. Abdollahramezani S. et al. Tunable nanophotonics enabled by chalcogenide phase-change materials // *Nanophotonics*. 2020. Т. 9. №. 5. С. 1189-1241.
12. Ovshinsky S. R. Optical cognitive information processing—a new field // *Japanese journal of applied physics*. 2004. Т. 43. №. 7S. С. 4695.
13. Kiselev A. V. et al. Dynamics of reversible optical properties switching of Ge₂Sb₂Te₅ thin films at laser-induced phase transitions // *Optics & Laser Technology*. 2022. Т. 147. С. 107701.
14. Raoux S., Wuttig M. *Phase Change Materials. Science and Applications*. Springer Science+Business Media. 2009.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИНАМИКА ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФАЗОИЗМЕНЯЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ

Н. Н. Елисеев, А.А. Бурцев, В. А. Михалевский, А.В. Киселев, В.В. Ионин,
А.А. Невзоров, В.В. Гребенев, А. А. Лотин

*Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, МО, Россия*

E-mail: nikolai.eliseev@phystech.edu

Фазоизменяемые материалы (ФИМ) представляют собой соединения, обладающие несколькими стабильными фазовыми состояниями (аморфное и одно или несколько кристаллических), свойства которых различны. Для большинства приложений идеальный ФИМ должен обеспечивать переключение фаз с высокой скоростью и низким энергопотреблением, большое количество циклов переключения, долгосрочную термическую стабильность аморфной фазы и большой оптический / электрический контраст между двумя фазами. [1, 2]. Данные свойства делают ФИМ перспективными материалами для создания оптоэлектронных [3], мемристивных [4] и нейроморфных устройств [5, 6].

Одним из наиболее известных и первым нашедший применение фазоизменяемых материалов является полупроводник-сегнетоэлектрик теллурид германия (GeTe). Позже широкое применение нашло тройное соединение $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST) благодаря более низкой температуре фазового перехода, что делает устройства на его основе менее энергоемкими по сравнению с GeTe. Сегодня большой интерес представляют ФИМ с «развязанными» между собой оптическими характеристиками показателем преломления n и коэффициентом экстинкции k . Такое интересное свойство проявляет GST, легированное селеном [7]. Эта уникальная особенность $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Se}_4\text{Te}_1$ (GSST) открывает перспективу его коммерческого использования, в первую очередь в волоконной оптике.

Для использования ФИМ в новых приложениях необходимо глубокое изучение температурной динамики фазового перехода между аморфной и кристаллической фазами, а также между метастабильной и стабильной кристаллической фазами. Однако, несмотря на интенсивные исследования свойств тонких пленок на основе соединений Ge-Sb-Te, данные об их теплофизических характеристиках в литературе противоречивы, а значения констант разбросаны в широком диапазоне [8]. Поэтому необходим комплексный анализ изменения свойств материалов в результате фазовых трансформаций при нагреве.

В работе представлены результаты исследования температурной динамики оптического коэффициента пропускания, удельного электрического сопротивления, энтальпии и структуры образцов тонких пленок GeTe, GST и GSST. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) были определены энтальпии фазовых переходов из исходного аморфного в стабильную кристаллическую фазы для первых двух материалов. При этом наблюдалось существенное ступенчатое изменение электрического удельного сопротивления на 4-6 порядка величины и оптического коэффициента пропускания на 80-100 % при фазовых переходах из исходного аморфного в стабильную кристаллическую фазу. Образец GSST демонстрирует высокотемпературный переход, что связано с высоким содержанием германия и селена [9]. Сплавы на основе Se обладают более высокой температурой кристаллизации, быстрой скоростью перехода, низкой теплопроводностью и низкой температурой плавления по сравнению с GST, и наряду с содержанием германия, обеспечивают очень высокую термическую стабильность аморфного состояния [10]. Пик сигнала ДСК в области перехода имеет сложную форму, которая является результатом наложения экзо- и эндотермического эффектов. Такая форма пика сигнала ДСК указывает на то, что

фазовый переход сопровождается интенсивной рекристаллизацией, что проявляется в виде двух конкурирующих эффектов. Данные измеренного электрического удельного сопротивления указывают на то, что аморфная фаза GSST обладает более высоким (почти два порядка) сопротивлением по сравнению с GeTe и GST. Высокая стабильность аморфного состояния этого материала открывает перспективы его применения в устройствах хранения данных. Фазовые состояния исследуемых материалов подтверждались рентгеноструктурным анализом и спектроскопией комбинационного рассеяния [11].

1. Raoux S., Wuttig M. Phase Change Materials. Science and Applications. Springer Science+Business Media. 2009.
2. Edwards A. H. et al. Theory of persistent, p-type, metallic conduction in c-GeTe //Journal of Physics: Condensed Matter. 2005. Т. 17. №. 32. С. L329.
3. Sreekanth K. V., M. ElKabbash, V. Caligiuri, R. Singh, A. De Luca, G. Strangi. New Directions in Thin Film Nanophotonics. Springer Nature Singapore. 2019.
4. Wright C. D. et al. Phase-change processors, memristors and memflectors //physica status solidi (b). 2012. Т. 249. №. 10. С. 1978-1984.
5. Zhang W. et al. Designing crystallization in phase-change materials for universal memory and neuro-inspired computing //Nature Reviews Materials. 2019. Т. 4. №. 3. С. 150-168.
6. Ionin V. V. et al. An optical synapse based on a polymer waveguide with a GST225 active layer //Applied Physics Letters. 2021. Т. 119. №. 8. С. 081105.
7. Zhang Y. et al. Broadband transparent optical phase change materials for high-performance nonvolatile photonics //Nature communications. 2019. Т. 10. №. 1. С. 1-9.
8. Козюхин С. А. и др. Материалы фазовой памяти и их применение //Успехи химии. 2022. Т. 91. №. 9.
9. Navarro G. et al. Trade-off between SET and data retention performance thanks to innovative materials for phase-change memory //2013 IEEE International Electron Devices Meeting. IEEE, 2013. С. 21.5. 1-21.5. 4.
10. Koch C. et al. Enhanced temperature stability and exceptionally high electrical contrast of selenium substituted $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ phase change materials //Rsc Advances. 2017. Т. 7. №. 28. С. 17164-17172.
11. Burtsev A. A. et al. Physical properties' temperature dynamics of GeTe, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ and $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Se}_4\text{Te}_1$ phase change materials //Materials Science in Semiconductor Processing. 2022. Т. 150. С. 106907.

СВЕТОИНДУЦИРОВАННАЯ МОДУЛЯЦИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

А. В. Киселев, А. А. Бурцев, В. В. Ионин, В. А. Михалевский, Н. Н. Елисеев,
А. А. Невзоров, А. А. Лотин

*Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, МО, Россия*

E-mail: kiselev.ilit.ras@gmail.com

Использование фазоизменяемых материалов в устройствах фотоники и оптоэлектроники требует глубокого изучения как температурной динамики фазового перехода между аморфной и кристаллической фазами, так и динамики индуцированного внешним энергетическим воздействием (например, импульсным лазерным излучением) фазового перехода и связанного с таким переходом изменения оптических свойств материала. Также для практического применения таких материалов важно точное определение энергетических параметров таких управляющих воздействий. Несмотря на интенсивные исследования свойств тонких пленок на основе соединений Ge-Sb-Te, их термические свойства изучены еще недостаточно, что подтверждается большим разбросом данных, часто не согласующихся между собой [1]. Это объясняется как сложностью структуры исходного кристаллического соединения, так и невозможностью воспроизведения структур аморфных слоев, полученных разными методами в разных лабораториях. Также, в основной своей массе, работы по изучению динамики фазовых переходов оперируют только данными изменения отражательной способности образца. Для практических применений необходим систематический анализ свойств материала, чтобы определить наиболее подходящий для применения в прикладных задачах оптоэлектроники и фотоники. В частности, необходимо детально изучить модуляцию электрофизических и оптических свойств, энергетические и динамические характеристики такой модуляции, а также важные аспекты структурного превращения при фазовом переходе как при прямом тепловом воздействии, так и при воздействии лазерным излучением.

Основными задачами представленной научной работы были: изучение температурной динамики физических свойств некоторых халькогенидных ФИМ (GeTe и GST₂₂₅), математическое моделирование температурной динамики фазового перехода, вызванного воздействием лазерного излучения наносекундной длительности и экспериментальное определение скоростей изменения оптических свойств тонкопленочных образцов таких материалов (на примере 100 нм образцов GST₂₂₅).

Для получения полной картины температурной динамики структурных превращений материала тонкопленочных образцов ФИМ необходим комплексный подход. Для этого в рамках представленной работы были проведены экспериментальные исследования температурной динамики проводимости, структуры, оптического пропускания и определения скрытых теплот фазовых переходов в образцах ФИМ [2]. Были определены температуры фазовых переходов несколькими методами и подтверждены рентгеноструктурными исследованиями и спектрами КР. Температуры кристаллизации, определенные методом ДСК (которым соответствуют экзотермические пики на соответствующих кривых), совпадают с характерными температурами, которые были определены по данным динамики удельного сопротивления и коэффициента оптического пропускания. Также были определены энтальпии (теплоты) фазовых переходов.

Переключение из кристаллической фазы в аморфную в тонких пленках ФИМ с помощью коротких лазерных импульсов обеспечивает, прежде всего, высокую скорость изменения их оптических характеристик. Динамика лазерно-индуцированных фазовых

переходов в пленках GST₂₂₅ толщиной 100 нм исследовалась в схеме pump-probe [3,4] по изменению коэффициентов пропускания T и коэффициента отражения R на длине волны зондирующего излучения 980 нм. Скорость изменения оптических коэффициентов определялась по осциллограммам сигналов быстродействующих фотоприемников.

Скорости нагрева и охлаждения после воздействия импульсного лазерного излучения хорошо согласуются [4] как с результатами работы модели, основанной на уравнении теплопроводности твердых тел, которое было представлено в [5] с учетом исходных данных для GST, полученных из литературных данных (удельная теплоемкость и теплопроводность из [6], и плотность различных фаз из [7]). Для более полной картины фазового перехода модель была расширена [4] с использованием классической задачи Стефана [8]. Такой подход позволяет учитывать скрытую теплоту перехода [9] за счет изменения теплоемкости материала в диапазоне температур фазового перехода.

Представлены результаты исследования температурной динамики оптического пропускания, удельного электрического сопротивления, энтальпии, спектров комбинационного рассеяния и структуры тонкопленочных образцов GeTe и GST₂₂₅. Наблюдалось ступенчатое изменение удельного электросопротивления на 4-6 порядков и оптического пропускания на 80-100% при кристаллизации. Для тонкопленочных образцов GST₂₂₅ продемонстрировано быстрое переключение оптических свойств, управляемое внешним импульсным лазерным излучением, сопровождающееся изменением коэффициента отражения на 17% и коэффициента пропускания на 14%. Время переключения оптических свойств, связанного с переходом тонкопленочного образца из аморфного состояния в кристаллическое, составило 23 нс, обратный переход происходил за время порядка 60 нс при воздействии на образец лазерного импульса с плотностью энергии 22 и 54 мДж/см² для прямого и обратного фазовых переходов соответственно. Результаты предлагают более целостное представление для понимания процесса кристаллизации в различных ФИМ и выбора материала для оптоэлектронных и фотонных приложений.

1. Kozyukhin S. A. et al. Phase-change-memory materials based on system chalcogenides and their application in phase-change random-access memory //Nanotechnologies in Russia. 2011. Т. 6. №. 3. С. 227-236.
2. Burtsev A. A. et al. Physical properties' temperature dynamics of GeTe, Ge₂Sb₂Te₅ and Ge₂Sb₂Se₄Te₁ phase change materials //Materials Science in Semiconductor Processing. 2022. Т. 150. С. 106907.
3. Kiselev A. V. et al. Transmissivity to reflectivity change delay phenomenon observed in GeTe thin films at laser-induced reamorphization //Optics & Laser Technology. 2021. Т. 143. С. 107305.
4. Kiselev A. V. et al. Dynamics of reversible optical properties switching of Ge₂Sb₂Te₅ thin films at laser-induced phase transitions //Optics & Laser Technology. 2022. Т. 147. С. 107701.
5. Eliseev N. N. et al. Wide range optical and electrical contrast modulation by laser-induced phase transitions in GeTe thin films //Results in Physics. 2020. Т. 19. С. 103466.
6. Lee J. et al. Thermal conductivity anisotropy and grain structure in Ge₂Sb₂Te₅ films //Journal of Applied Physics. 2011. Т. 109. №. 8. С. 084902.
7. Njoroge W. K., Wöltgens H. W., Wuttig M. Density changes upon crystallization of Ge₂Sb_{2.04}Te_{4.74} films //Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. 2002. Т. 20. №. 1. С. 230-233.
8. Gupta S.C. The Classical Stefan Problem. Basic Concepts, Modelling and Analysis. Elsevier Science B.V., 2003.
9. Yamada N. Potential of Ge-Sb-Te phase-change optical disks for high-data-rate recording in the near future //Optical Data Storage 1997 Topical Meeting. SPIE, 1997. Т. 3109. С. 28-37.

ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. А. Михалевский, А. А. Невзоров, М. Д. Хоменко, А. А. Бурцев, А. В. Киселев,
Н. Н. Елисеев, В. В. Ионин, А. А. Лотин

*Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, МО, Россия*

E-mail: uhr@inbox.ru

Фазоизменяемыми материалами (ФИМ) в самом широком смысле являются такие соединения, фаза которых может переключаться между как минимум двумя различными и стабильными состояниями посредством процессов теплообмена. Большинство материалов может быть аморфизировано при достаточно быстром охлаждении. Однако лишь некоторые из них демонстрируют сильный контраст в оптических и электрофизических свойствах между аморфным и кристаллическим состояниями [1]. Соединения, содержащие по крайней мере один из группы халькогенов: серу (S), селен (Se), теллур (Te) или полоний (Po), известные как халькогенидные стекла, дали начало так называемым материалам фазовой памяти (PCRAM) и представляют собой в настоящее время очень активно развивающуюся исследовательскую тему, особенно в области разработки модулей энергонезависимой памяти [2, 3].

Кристаллизация происходит под нагревом материала сфокусированным лазерным лучом выше его температуры кристаллизации, но ниже температуры плавления. Поскольку атомы очень подвижны при повышенных температурах, аморфное состояние быстро превращается в кристаллическое. Обычно кристаллизация происходит по механизму зарождения (нуклеации) и роста кристаллитов. При таком механизме сначала образуются небольшие кристаллические зародыши, которые впоследствии растут. Образование зародышей может происходить на поверхности/границе раздела и/или в объеме материала [4]. В первом случае говорят о гетерогенном зародышеобразовании, тогда как гомогенное зарождение происходит в объеме. Чтобы понять кинетику кристаллизации, сначала необходимо учесть энергию активации зародышеобразования. Поверхностная энергия зародышей дает положительный вклад в свободную энергию системы. Таким образом, чистое изменение свободной энергии является суммой уменьшения объема свободной энергии из-за кристаллизации и увеличения свободной энергии из-за поверхностной энергии или, лучше сказать, энергии границы раздела. Кроме того, может присутствовать член энергии деформации, если объем изменяется при кристаллизации. Радиус зародыша, при котором зародыши кинетически стабильны и рост предпочтительнее растворения зародыша, называется критическим размером зародыша [5]. Чаще всего измеряли общую скорость фазового превращения вместо выделения стадий зародышеобразования и роста. Для большинства устройств на основе ФИМ преобладает гетерогенный механизм кристаллизации вследствие тонкопленочной реализации [6]. Более того, гетерогенное зародышеобразование в устройствах ФИМ часто усиливается (т.е. добавляются неоднородности) за счет диэлектрических покрывающих слоев.

Кинетические особенности стадии зародышеобразования и роста кристаллитов можно описать на основе теории Колмогорова-Аврами-Мела-Джонсона [7, 8]. Обычно прогресс кристаллизации ФИМ ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$) можно оценить на основе изменения электрофизических или оптических характеристик материала [9-11]. В данной работе для исследования кинетики фазовых превращений под действием импульсного лазерного излучения согласованно решается система уравнений, состоящая из уравнения теплопроводности и интегро-дифференциального уравнения для объемной доли превратившейся фазы [12].

Помимо изменения свойств материала, верификацию модели после воздействия импульсного лазерного излучения нано- и фемтосекундной длительности проводили на основе данных просвечивающей электронной микроскопии [13, 14]. Наблюдаемый характер кристаллизации тонкого слоя в глубине образца можно объяснить слишком высокой температурой на поверхности пленки после воздействия импульса, превышающей температуру плавления. Быстрое радиационное охлаждение приводит к реаморфизации материала в приповерхностном слое, в то время как температурная динамика на небольшой глубине способствует росту кристаллической фазы. Структура кристаллической фазы с перекрытием границ плотно упакованных зерен характерна для процесса фазового перехода с преобладанием интенсивного зародышеобразования [15]. О высокой температуре кристаллизации свидетельствует относительно крупный размер кристаллитов [13, 16].

1. Wuttig M., Raoux S. The science and technology of phase change materials //Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. 2012. Т. 638. №. 15. С. 2455-2465.
2. Wuttig M., Yamada N. Phase-change materials for rewriteable data storage //Nature materials. 2007. Т. 6. №. 11. С. 824-832.
3. Козюхин С. А. и др. Материалы фазовой памяти и их применение //Успехи химии. 2022. Т. 91. №. 9.
4. Raoux S., Wuttig M. Phase Change Materials. Science and Applications. Springer Science+Business Media. 2009.
5. Meinders E. R., Mijiritskii A. V., van Pieterse L., Wuttig M. Optical Data Storage. Phase-Change Media and Recording. Springer Science+Business Media. 2006.
6. Sreekanth K. V., M. ElKabbash, V. Caligiuri, R. Singh, A. De Luca, G. Strangi. New Directions in Thin Film Nanophotonics. Springer Nature Singapore. 2019.
7. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов //Известия Российской академии наук. Серия математическая. 1937. Т. 1. №. 3. С. 355-359.
8. Avrami M. Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III //The Journal of chemical physics. 1941. Т. 9. №. 2. С. 177-184.
9. Yang I. et al. Effect of doped nitrogen on the crystallization behaviors of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ //Journal of The Electrochemical Society. 2010. Т. 157. №. 4. С. H483.
10. Weidenhof V. et al. Laser induced crystallization of amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ films //Journal of applied physics. 2001. Т. 89. №. 6. С. 3168-3176.
11. Burtsev A. A. et al. Laser-Induced Crystallization Kinetics of GeTe and $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ Thin Films //Сборник трудов конференции «International Conference on Advanced Laser Technologies (ALT)». 2021. №. 21. С. 81.
12. Гришаев Р. В., Мирзаде Ф. Х., Хоменко М. Д. Моделирование фазовых переходов при селективном лазерном спекании методом инъекции порошков //Перспективные материалы. 2013. №. S14. С. 241-248.
13. Kiselev A. V. et al. Dynamics of reversible optical properties switching of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ thin films at laser-induced phase transitions //Optics & Laser Technology. 2022. Т. 147. С. 107701.
14. Nevzorov A. A. et al. Two-stage conductivity switching of GST thin films induced by femtosecond laser radiation //Optics & Laser Technology. 2023. Т. 157. С. 108773.
15. Zhu Z. et al. Comparative study on crystallization characteristics of amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ films by an ultraviolet laser radiation and isothermal annealing //Applied Surface Science. 2015. Т. 335. С. 184-188.
16. Sun X. et al. Crystallization of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ thin films by nano-and femtosecond single laser pulse irradiation //Scientific reports. 2016. Т. 6. №. 1. С. 1-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ РАЗРЯДОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕМЕНТОВ ТЕРМОРЕГУЛИРУЮЩИХ ПОКРЫТИЙ РАДИАТОРОВ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ

В. А. Басов

Акционерное общество «Композит», г Королев Московской области

E-mail: slavabas@list.ru

В условиях эксплуатации космический аппарат (КА) подвергается воздействию множества повреждающих факторов космического пространства таких как электромагнитное и корпускулярное излучение Солнца, частицы радиационных поясов Земли, галактические и солнечные космические лучи, космическая плазма, глубокий вакуум, твердые частицы естественного и искусственного происхождения, а на низких орбитах также атомарный кислород [1]. Воздействие заряженных частиц на диэлектрические материалы используемые при изготовлении КА приводит к накоплению поверхностного и объемного электрического заряда, индуцирующего электрические поля высоких напряженностей. При достижении критических значений напряженности поля возникают электростатические разряды (ЭСР), сопровождающиеся генерацией электромагнитных импульсов, разрушением структуры материала, выбросом в окружающее пространство плазмы и сгустков заряженного вещества, осаждение которого на элементах поверхности КА может привести к заметной деградации их функциональных свойств [2-5]. При этом известно, например, что с деградацией оптических свойств отражающих покрытий терморadiаторов уменьшается радиационный сброс тепла, что может привести к перегреву бортовой аппаратуры.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований процессов сопровождающих облучение элементов терморегулирующих (отражающих) покрытий КА электронами с энергией 40 кэВ. Исследовавшиеся образцы элементов отражающих покрытий были изготовлены на основе пластин стекла К-208 на одну и поверхностей которых методом магнетронного напыления были последовательно нанесены слои серебра и нержавеющей стали. Электронное облучение образцов проводилось в вакуумной камере установки «УВ»-1/2 при давлении 10^{-4} Па и плотности потока частиц (φ) от $1 \cdot 10^9$ до $8 \cdot 10^{12}$ см $^{-2}$ с $^{-1}$. Поверхности образцов до и после облучения исследовалась методами атомно-силовой микроскопии (АСМ). На облучаемой поверхности образцов возникали электростатические разряды (ЭСР), параметры которых характеризовались осциллограммами генерируемых электромагнитных импульсов.

На рисунке 1 приведена схема регистрации ЭСР и возникающих при облучении токов утечки на проводящую подложку с использованием двухлучевого осциллографа RIGOL MSO2302A.

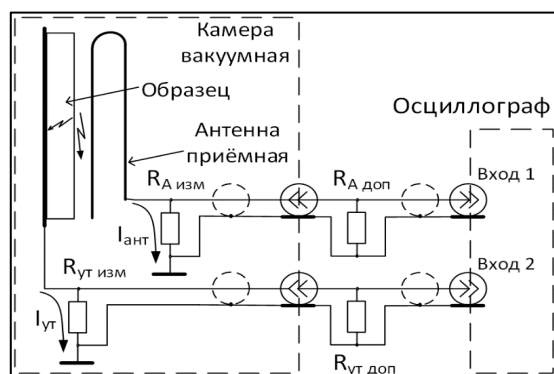


Рис. 1 Схема регистрации электромагнитных импульсов и токов утечки

Для облучения квадратные (40×40 мм) образцы толщиной 0.17 мм, прикрепляли к полированной поверхности металлического термостатированного столика, и воздействовали электронами разной интенсивности. Температура столика поддерживалась на уровне $(20 \pm 1) ^\circ\text{C}$. Возникновение ЭСР визуально наблюдалось через иллюминатор вакуумной камеры и регистрировались осциллографом.

Анализ полученных результатов показал, что изменения структуры облучаемой поверхности образцов обусловлены появлением следов ЭСР и образованием на ней газонаполненных пузырьков. Установлено, что частота ЭСР и величина тока утечки растут с увеличением плотности потока электронов в исследованном диапазоне, однако эти зависимости существенно различаются. Измерения проведенные при облучении образцов при постоянном значении $\phi = 2.0 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ показали, что с увеличением флюенса электронов от $1 \cdot 10^{14}$ до $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ частота ЭСР возрастает, но при этом амплитуда электромагнитных импульсов снижается.

В качестве примера на рис. 2. представлен характерный вид осциллограммы электромагнитного импульса, генерируемого при ЭСР ($\phi_e = 10^{10} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$)

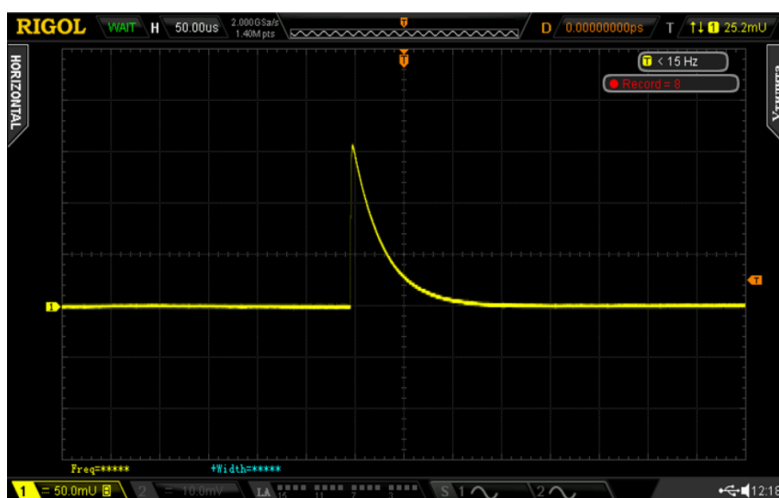


Рис. 2. Осциллограмма электромагнитного импульса, генерируемого при ЭСР

1. Модель космоса. Научно-информационное издание. Под ред. Л. С. Новикова. М.: КДУ, 2007.
2. C. Koons, J. E. Mazur, R. S. Selesnick, J. B. Blake, J. F. Fennell, J. L. Roeder, P. C. Anderson: The impact of the space environment on space systems. Proc. 6th Spacecraft Charging Technology Conf. (Air Force Research Laboratory, 1998) p. 7.
3. Ferguson D.C., Katz I. The Worst-Case GEO Environment and the Frequency of Arcs in GEO. IEEE Transactions on Plasma Science, 2015, v. 43, No. 9, pp. 3021-3026.
4. Хасаншин Р.Х., Новиков Л.С., Гаценко Л.С., Волкова Я.Б. Электроразрядные процессы при облучении стекол К-208 и CMG электронами с энергией в диапазоне от 10 до 40 кэВ. // Перспективные материалы, 2015, №1, С. 22-30
5. Gedeon O., Zemek J., Jurek K. J. Non-Crystalline Solids, 2008, V. 354, Iss.12–13, p. 1169. DOI: 10.1016/j.noncrsol.2006.12.125.

К ИССЛЕДОВАНИЮ ПОТЕРИ МАССЫ ТЕРМОРЕГУЛИРУЮЩИХ ПОКРЫТИЙ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ В ВАКУУМЕ

И. Б. Винтайкин

¹Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, факультет фундаментальных наук, кафедра физики, Москва, Россия,

E-mail: Vintaikin_Ivan@mail.ru

Благодаря технологичности и низкой себестоимости полимерные композиционные материалы все чаще используются при изготовлении изделий космической техники в качестве терморегулирующих покрытий (ТРП), обеспечивающих заданный температурный режим. При этом такие материалы являются основными источниками продуктов собственной внешней атмосферы (СВА) космического аппарата (КА), образующейся в его окрестности за счёт потери массы материалов внешних покрытий, газовыделения негерметичных отсеков и т.д., и негативно влияющей на работу бортовой аппаратуры в основном в результате загрязнения оптических поверхностей КА [1-5] и за счет увеличения вероятности развития газовых форм электростатических разрядов [6].

Разработка расчетно-экспериментальных методов исследования потери масс полимерных материалов в вакууме при облучении обусловлено необходимостью прогнозировать последствия их применения в условиях повышенных радиационных нагрузок, в частности на внешних поверхностях высокоорбитальных, в том числе и геостационарных спутников. Например, для надёжного прогнозирования параметров СВА КА в первую очередь необходимо определить характеристики основных источников её компонент.

В данной работе приводится описание результатов экспериментальных исследований потери массы образцов ТРП как при воздействии на их образцы электронного излучения с постоянной плотностью потока (ϕ) 10^{11} $\text{см}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$ при варьировании флюенса облучения в диапазоне от 10^{13} до 10^{16} см^{-2} , так и потери массы облученных образцов и исходных образцов ТРП при вакуумно-тепловом воздействии по динамике осаждения продуктов газовыделения на чувствительном элементе кварцевых микровесов. Это позволило получить экспериментальную зависимость радиационно-стимулированной ПМ материала от флюенса облучения, а также оценить количество накопившихся в образцах продуктов радиолиза.

Экспериментальные исследования радиационно-стимулированной потери массы образцов ТРП ЭКОМ- и ЭКОМ-2 проводились в два этапа. На первом этапе образцы материала максимально близкие по массе нанесенные на металлическую подложку облучали до заданных значений флюенсов в вакуумной камере при давлении 10^{-4} Па и температуре подложки (22 ± 1) °С. На втором этапе у части облучённых образцов и образцов исходных материалов измеряли динамику термостимулированной потери массы с помощью кварцевых микровесов в вакуумной камере при давлении 10^{-5} Па, а другая часть образцов была использована для измерения масс-спектров при температуре 60 и 120 °С. В начале и в конце каждого этапа образцы материалов взвешивали на микровесах AUW-220D Shimadzu (точность измерений $\pm 10^{-5}$ г).

В качестве примера, на рисунке 1 представлена зависимость потери массы материала ЭКОМ-2 от времени облучения при $\phi = 10^{11}$ $\text{см}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$. Максимальное значение флюенса при этом составило $1,1 \cdot 10^{16}$ см^{-2} .

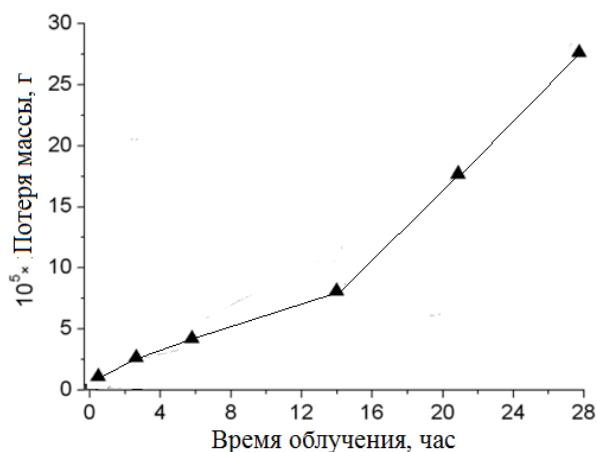


Рис.1. Зависимость потери массы материала ЭКОМ-2 от времени облучения при $\phi = 10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$.

Для качественной интерпретации полученных экспериментальных результатов предложена математическая модель миграции продуктов радиолиза в исследованных материалах. На рис. 2 показаны распределение потока и концентрации молекул CO_2 в образце ЭКОМ-1.

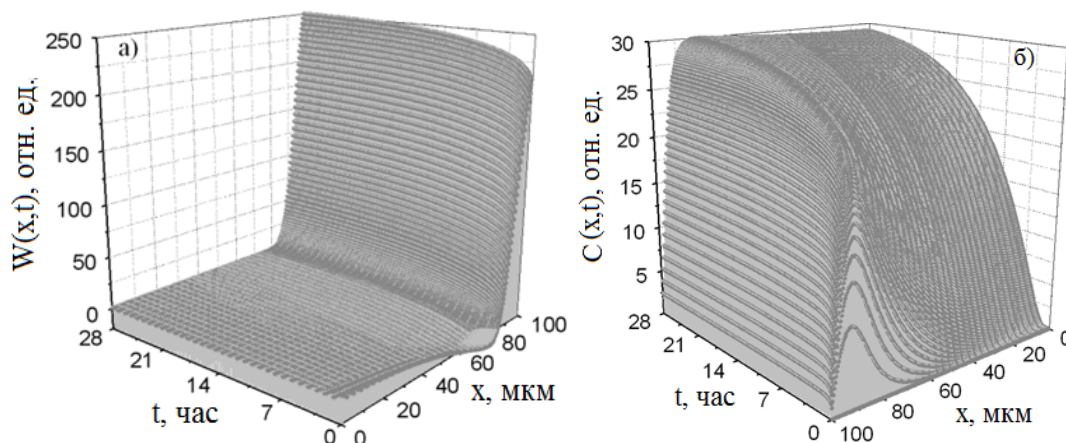


Рис.2. Пространственно-временное распределение потока (а) и концентрации молекул CO_2 (б) в образце ЭКОМ-1.

1. Модель космоса. Научно-информационное издание. //Под ред. Л.С. Новикова.– Т.2: Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. – М.: КДУ, 2007. 1144 С.
2. Bitetti G., Marchetti M., Mileti S. Degradation of the surfaces exposed to the space environment // J. Acta Astronautica, 2007, V. 60, pp. 166-174.
3. Chen P.T. Contamination Effects due to Space Environmental Interactions. 39-th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit 8-11 January 2001 Reno, Nevada. 2001, AIAA Paper 2001-0095.
4. Khassanchine R.H., Timofeev A.N., Grigorevskiy A.V., Galygin A.N. Simulation of electron radiation on outgassing of spacecraft materials // J. of Spacecraft and Rockets. 2006. 43, № 2. P. 410.
5. Zhao Xiaohu, Shen Zhigang, Xing Yushan, Ma Shulin. Effect of molecular contamination on spacecraft // J. Acta Aeronautical and Astronautical Science, 2009, V. 30(1) pp. 159-164.
6. Р.Х. Хасаншин, Л.С. Новиков, С.Б. Коровин. Влияние давления остаточной атмосферы на развитие электростатических разрядов на поверхности защитных стекол солнечных батарей // Поверхность. Рентген-, синхротрон. и нейтрон. исслед., 2016, №10, С. 14-24.

ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В ДВУМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Ю.В. Балакшин¹, Д.К. Миннебаев¹, А.А. Шемухин¹, О.М. Марченко¹, А.Д. Шпорин²

¹*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия*

²*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,*

E-mail: balakshiny@gmail.com

Углерод в sp^2 гибридизации с толщиной слоя в один атом и составляющий гексагональную кристаллическую решетку называется графеном и представляет большой интерес для науки и техники благодаря ряду его электрофизических свойств. Электрические и оптические свойства графена крайне чувствительны к дефектам в его структуре. Ионное облучение позволяет контролируемо создавать дефекты в упаковке атомов, что является определяющим фактором при изучении влияния дефектов на свойства графеновых покрытий.

В работе было исследовано влияние параметров ионного облучения на формирование дефектов в графеновом покрытии, состоящем из нескольких слоев графена, осажденном на медную фольгу [1].

Облучение графенового покрытия проводилось на ускорительном комплексе HVEE-500 НИИЯФ МГУ [2] с использованием ионов He^+ и Ar^+ при энергии 100 кэВ при комнатной температуре образца. Флюенс составлял от 10^{12} до 10^{13} ион/см² для ионов аргона и от 10^{13} до 10^{16} ион/см² для ионов гелия. Плотность тока пучка ионов поддерживалась на уровне 100 нА/см² для исключения термического отжига в процессе облучения. Исследование структуры мишеней до и после облучения проводилось методом комбинационного рассеяния света. Спектры КРС были получены с применением лазера с длиной волны 473 нм, мощность пучка не превышала 0.25 мВт, диаметр луча составлял 1 мкм. Моделирование дефектообразования в процессе облучения проводилось с использованием программы SRIM [3]. Перевод параметров облучения в величину параметра DPA – смещений на атом, проводился согласно [4].

Компьютерное моделирование дефектообразования под действием ионного облучения основанное на статистическом моделировании каскадов бинарных столкновений продемонстрировало развитие этапов процесса дефектообразования в графеновом покрытии для различных значений параметра DPA. В процессе моделирования дефектообразования в графеновом покрытии учитывались обратнорассеянные от поверхности меди налетающие ионы, а также процесс распыления медной подложки. Было показано, что происходит накопление точечных дефектов до значений параметра DPA $5 \cdot 10^{-4}$, после чего начинается процесс объединения активных областей дефектов, и при значениях параметра DPA $5 \cdot 10^{-3}$ происходит разрушение порядка в расположении атомов углерода с переходом в состояние аморфной формы углерода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 20-72-10118 «Ионное облучение как метод модифицирования электрических и оптических свойств углеродных наноструктур».

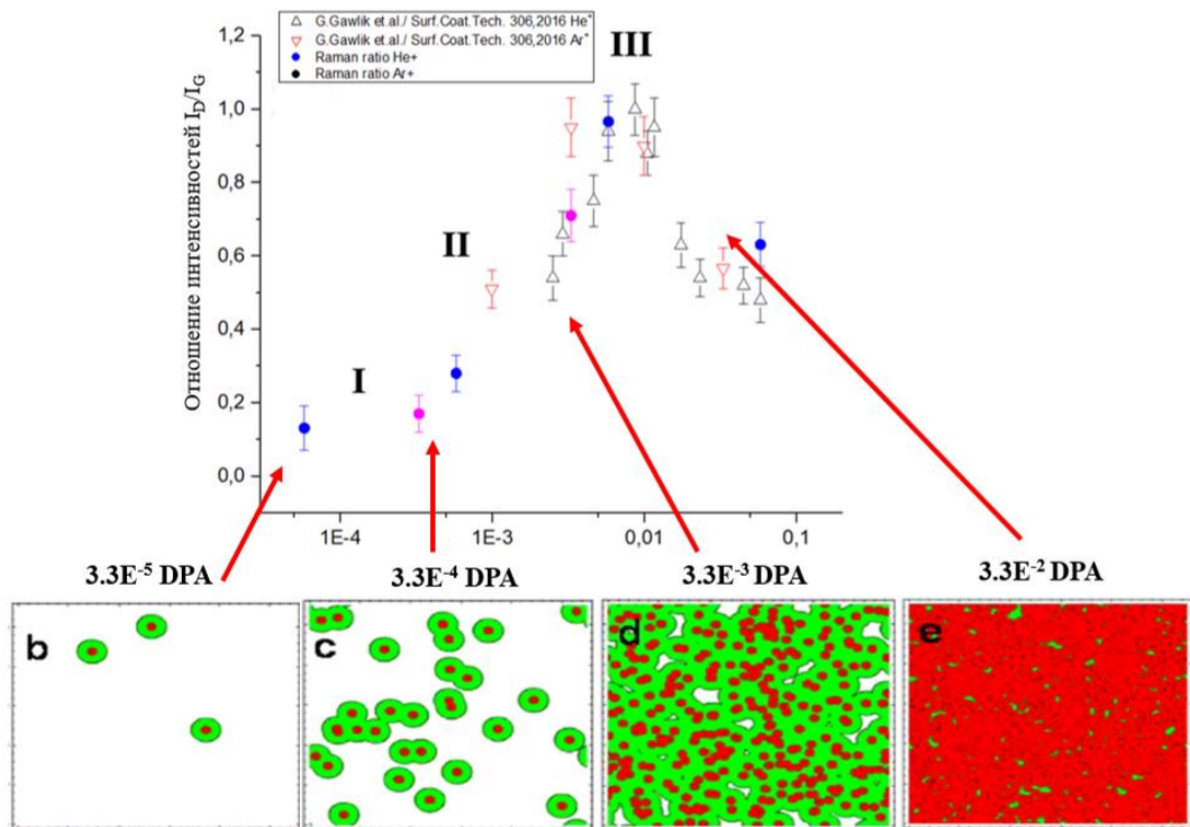


Рисунок 1 Зависимость соотношения I_D/I_G от величины параметра DPA

1. D.K. Minnebaev, Yu.V. Balakshin et.al // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, Vol. 460, 2019
2. Yu.V. Balakshin, A.A. Shemukhin, A.V. Nazarov, A.V. Kozhemiako, V.S. Chernysh // Technical Physics, Vol. 63, Issue 12, 2018
3. J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, Vol. 268, 2010
4. Yu.V. Balakshin, D.K. Minnebaev, E.A. Vorobyeva, A.P. Evseev, A.V. Nazarov, A.A. Shemukhin, V.S. Chernysh // Moscow University Physics Bulletin, Vol. 77, Issue 3, 2022

ЭЛЕКТРОННАЯ И ИОННАЯ ЭМИССИЯ С ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ КЛАСТЕРНЫМИ ИОНАМИ

Д.С. Киреев, А.Е. Иешкин, Д. Р. Бессмертный, И. Н. Кутлусурин

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

E-mail: dmtr.kireeff6497@yandex.ru

Пучки газовых кластерных ионов (GCIB) – перспективный метод модификации поверхности, который активно используется для решения практических задач микро- и нанoeлектроники, а также в методиках диагностики элементного состава поверхности, таких как МСВИ и РФЭС. На сегодняшний день опубликовано множество работ, посвященных характеристикам кластерных ионных пучков, таких как зарядовое состояние кластерных ионов в пучке [1,2], их распределение по массам [3], а также процессу взаимодействия кластерных ионов с поверхностью твердого тела [4]. Однако, процесс эмиссии вторичных частиц, сопровождающий распыление твердых тел при кластерной бомбардировке остается практически неизученным.

На ускорителе кластерных ионов МГУ им. Ломоносова [5] были исследованы процессы вторичной ионной эмиссии и эмиссии электронов из поверхности Al и Mo под действием кластерных ионов Ar_{800}^+ в диапазоне энергий от 2 до 14 кэВ. Полученные значения коэффициентов эмиссии показывают сильную зависимость интенсивности эмиссии от энергии кластерного иона. Показано, что эмиссия электронов происходит также, когда энергия, приходящаяся на каждый атом кластера, ниже классического порога кинетической ионно-электронной эмиссии.

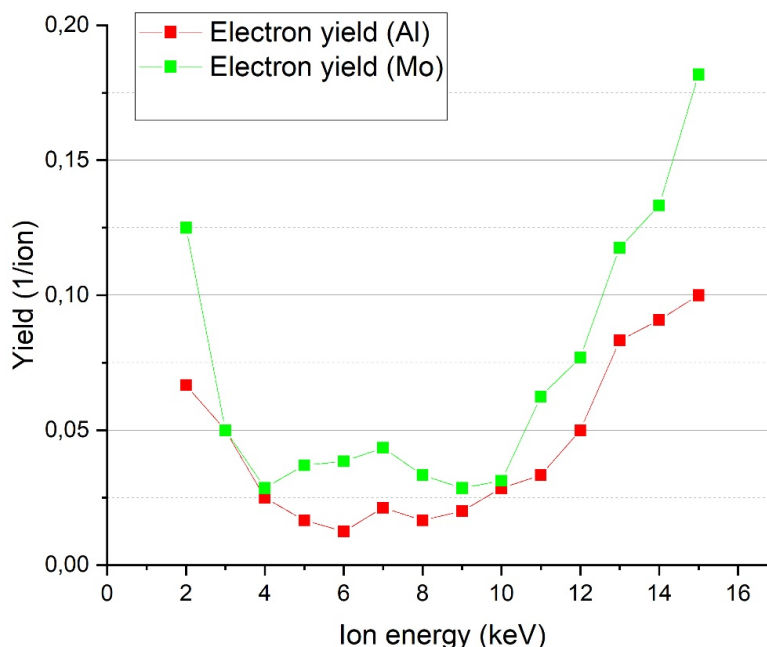


Рис.1. Зависимость коэффициента электронной эмиссии от энергии кластерных ионов при облучении Al и Mo.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-79-10224).

1. Swenson D.R. Measurement of averages of charge, energy and mass of large, multiply charged cluster ions colliding with atoms // Nucl Instrum Methods Phys Res B. 2004. Vol. 222, № 1–2. P. 61–67.
2. Toyoda N., Yamada I. Evaluation of charge state of gas cluster ions by means of individual crater observations // Nucl Instrum Methods Phys Res B., 2013. Vol. 307. P. 269–272.
3. Korobeishchikov N.G., Nikolaev I. v., Roenko M.A. Effect of argon cluster ion beam on fused silica surface morphology // Nucl Instrum Methods Phys Res B., 2019. Vol. 438, № September 2018. P. 1–5.
4. Yamada I. Historical milestones and future prospects of cluster ion beam technology // Appl Surf Sci., 2014. Vol. 310. P. 77–88.
5. Kireev D.S. et al. Cluster Ion Accelerator and Its Application for High-Precision Surface Polishing // Vestnik of Ryazan State Radio Engineering University. 2018. Vol. 66–2. P. 40–48.

СОЗДАНИЕ МИКРОРЕЛЬЕФА ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ АДГЕЗИИ КЛЕТОК НЕК-293 НА ПОВЕРХНОСТИ ПДМС ПОМОЩЬЮ ПУЧКА ИОНОВ АРГОНА

О. М. Марченко^{2,3}, А. П. Яковлев³, Д. К. Миннебаев^{1,2}, А. А. Шемухин²,
А. С. Ерофеев³, П. В. Горелкин³

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия,

E-mail: oleg.marchenko.99@bk.ru

В настоящее время имеет высокую актуальность изучение поведения биологических объектов на различных поверхностях. Коллективом авторов в рамках разработки микрофлюидных устройств проведено модифицирование поверхности гладкого полидиметилсилоксана (ПДМС) пучком ионов Ag с энергией 10 КэВ. Было получено два образца с различными углами падения ионного пучка на поверхность. Исследована структура модифицированной поверхности методами оптической и атомно силовой микроскопии, на рис. 1 приведены характерные параметры поверхности образцов.

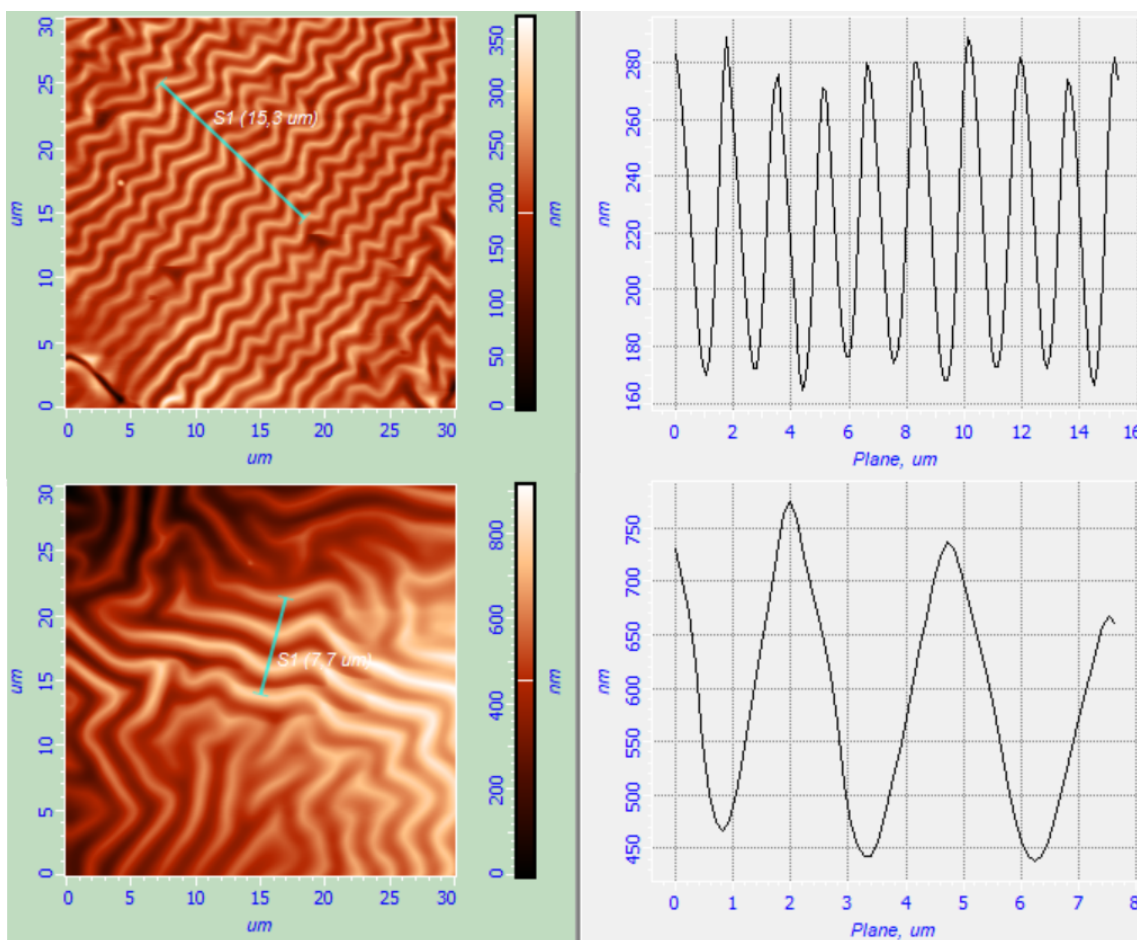


Рис. 1. Структура поверхности образцов после ионного облучения.

Клеточная линия НЕК-293 (клетки почек эмбриона человека) была посажена на полимерную подложку в количестве 200 тыс. в расчете на один образец. Изучение клеточной адгезии к поверхности проводилось при помощи метода Сканирующей ион-проводящей микроскопии, при использовании нанокapилляров размерами 40 нм. Были получены топографические изображения клеток для разных методов облучения полимеров, а также рассчитаны распределения модуля Юнга для двух типов исходных образцов – облученных под 60 и 90 градусов. Результаты исследований приведены на рисунке 2.

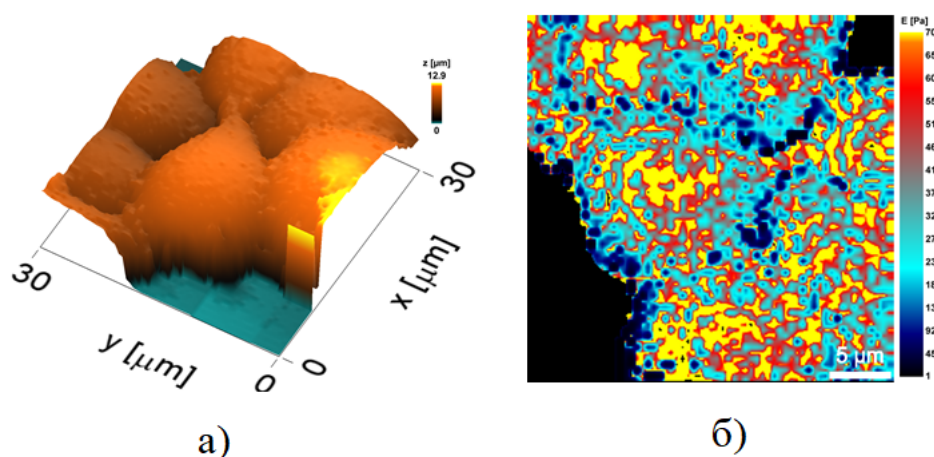


Рис. 2. а) 3D-визуализация НЕК-293 на PDMS, облученным под углом 60°, б) Распределение модуля Юнга для НЕК-293 на PDMS, облученным под углом 60°.

1. B. R. Winton, M. Ionescu, S. X. Dou, D. Wexler, G. A. Alvarez Structural and morphological modification of PDMS thick film surfaces by ion implantation with the formation of strain-induced buckling domains // *Acta Materialia*. - 2010. - №5. - С. 1861-1867.
2. И. В. Васенина МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ И ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКИ: дис. канд. ф.-м. наук: 01.04.07. - Томск, 2019. - 201 с.
3. Winton, Brad R., Low energy metal ion implantation of poly-di-methylsiloxane (PDMS) for increased biocompatibility for use in tissue engineering applications, Doctor of Philosophy thesis, University of Wollongong. Institute for Superconducting and Electronic Materials, University of Wollongong, 2010.
4. M. Ionescu, B. Winton, D. Wexler, R. Siegele, A. Deslantes, E. Stelcer, A. Atanacio, D.D. Cohen, Enhanced biocompatibility of PDMS (polydimethylsiloxane) polymer films by ion irradiation, *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. Atoms*. 273 (2012) 161–163.
5. Robert Huszanka, Attila Bonyár, Judit Kámán, Enikő Furua Wide range control in the elastic properties of PDMS polymer by ion beam (H+) irradiation // *Polymer Degradation and Stability*. - 2018. - №152. - С. 253-258.

МЕХАНИЗМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ И ИОНОВ Ar И He НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ С МЕТИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ LOW-K ДИЭЛЕКТРИКОВ

А. А. Соловых¹, А. А. Сычева², Е. Н. Воронина^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: solovykh.aa19@physics.msu.ru

Для изоляции медных проводников в межслойных соединениях современных сверхбольших интегральных схем (СБИС), активно применяют нанопористые органосиликатные пленки с ультранизким значением диэлектрической проницаемости $k < 2.5$ (low-k диэлектрики) на основе аморфных матриц SiO_x [1-3]. Поверхности таких диэлектриков покрывают гидрофобными метильными CH_3 -группами с целью минимизации деградации пленок под действием паров воды. Однако из-за сложного рельефа поверхности и наличия этих групп затрудняется решение другой проблемы, возникающей при использовании low-k материалов, – диффузии вглубь диэлектрика атомов меди, из которой изготавливаются проводящие элементы СБИС. Для предотвращения процесса диффузии создаются ультратонкие металлические барьерных слои из тугоплавких металлов, разделяющие медь и диэлектрик. Для усиления адгезии атомов металла с диэлектриком необходимо провести предварительную обработку тонкого приповерхностного слоя материала путем удаления CH_3 -групп, т.е. функционализацию поверхности low-k пленок. Чтобы снизить возможную деградацию пленок, такую обработку планируется производить ионами низкой (до ~ 20 эВ) энергии.

В докладе будут представлены результаты моделирования взаимодействия атомов и ионов Ar и He с упрощенной молекулярной моделью поверхности low-k диэлектрика – молекулой ПОСС (полиэдрические олигомерные силсесквиоксаны) при начальной энергии E_0 налетающих частиц в диапазоне 5–20 эВ. Результаты были получены с использованием квантовомеханического метода теории функционала плотности (DFT) в программном комплексе VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [4-5], предназначенном для моделирования периодических систем, в базисе плоских волн с использованием псевдопотенциалов PAW. Расчеты проводились на суперкомпьютере МГУ «Ломоносов-2» [6], для визуализации полученных результатов, использовалась программа VMD [7].

Выполненное моделирование показало, что воздействие атомов и ионов Ar на поверхность low-k диэлектрика может приводить к разрыву Si-C связи и последующему отрыву CH_3 -радикала [8]. Пороговая энергия атомов Ar и He, при которой происходит вылет CH_3 -группы, принимает минимальное значение ~ 11 эВ и $\sim 12,5$ эВ соответственно, в случае воздействия на атом C под углом 90° к Si-C связи. Детальный анализ полученных расчетных данных позволил выявить основные особенности механизма удаления метильных групп при воздействии атомов и ионов, имеющих различные массы и зарядовые числа. В качестве примера на рис. 1а,б представлены последовательные изменения положений атомов в молекуле ПОСС и налетающего атома (а) и иона (б) Ar для рассчитанных траекторий, когда происходил вылет CH_3 -радикала, а на рис. 1в – временные зависимости кинетической энергии CH_3 -радикала при различной начальной энергии E_0 . Приведенные данные показывают, что в отличие от нейтрального атома воздействие положительно заряженного иона Ar вызывает образование на поверхности low-k диэлектрика структурного дефекта с локализованным на нем избыточным

положительным зарядом (табл. 1). Вследствие появления такого дефекта вылетающий CH_3 -радикал практически не испытывает притяжения со стороны поверхности, что подтверждается незначительным изменением его кинетической энергии со временем (рис. 1в). На основании сопоставительного анализа результатов моделирования для Ar и He сделан вывод о принципиально различающихся механизмах такого воздействия.

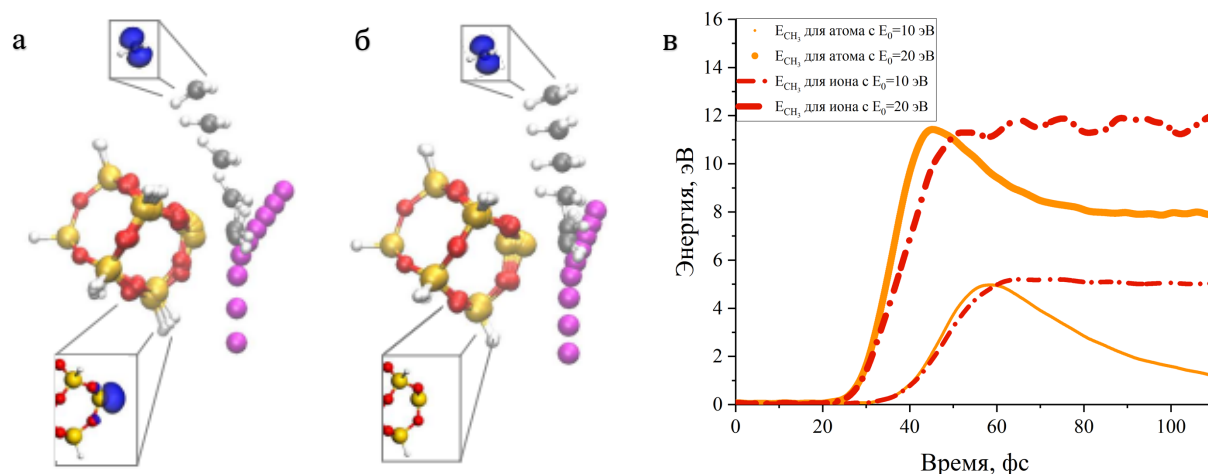


Рис. 1. Последовательные изменения положений атомов в молекуле ПОСС и налетающего Ar ($E_0 = 12.5$ эВ) без учета заряда (а) и с учетом заряда (б), отмеченные каждые 10 фс в течение первых 140 фс моделирования, на вставках синим цветом показано пространственное распределение спиновой электронной плотности (для значения 0.05 \AA^{-3}) в молекуле ПОСС и CH_3 -радикале [8]; в – полная энергия метильной группы для расчетов с атомом и ионов аргона с энергиями 10 и 20 эВ

Таблица 1. Параметры молекулы ПОСС и CH_3 -радикала до и после воздействия Ar (R — длина связи, α — валентный угол, Q — частичный заряд атома)

| | Наличие заряда | R , А | | α , deg | | Q , e | |
|------------------------------------|----------------|---------|------|----------------|-------|---------|-------|
| | | Si-O | C-H | O-Si-O | H-C-H | Si | O |
| До взаимодействия | - | 1,65 | 1,10 | 109,35 | 108,3 | +1,77 | -0,93 |
| После вылета CH_3 -группы | Без заряда | 1,65 | 1,10 | 109,67 | 120,0 | +1,35 | -0,91 |
| | С зарядом | 1,58 | 1,10 | 119,92 | 120,0 | +1,75 | -0,87 |

1. M.R. Baklanov. Low-k Advanced Interconnects for ULSI technology. Ho P.S., Zschech E. (Eds.). Wiley & Sons. 2012. 596 с.
2. M.R. Baklanov, J.-F. de Marneffe, D. Shamiryan, A.M. Urbanowicz, H. Shi, T.V. Rakhimova, H. Huang, and P.S. Ho. Plasma processing of low-k dielectrics // J. Appl. Phys. 2013. V. 113. 041101.
3. W. Volksen et al. Low Dielectric Constant Materials // Chem. Rev. 2010. V. 110. P. 56.
4. G. Kresse, J. Furthmuller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
5. G. Kresse and D. Joubert. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. 1758.
6. V.V. Voevodin, A.S. Antonov, D.A. Nikitenko, P.A. Shvets, S.I. Sobolev, I.Yu. Sidorov, K.S. Stefanov, V.V. Voevodin, S.A. Zhumatiy. Supercomput. Front. Innov. 2019. V. 6(2). P. 4.
7. W. Humphrey, A. Dalke and K. Schulten. VMD -Visual Molecular Dynamics. J. Molecular Graphics. 1996. V. 14. P. 33-38.
8. А. А. Соловых, А. А. Сычева, Е. Н. Воронина. Функционализация поверхности low-k диэлектриков ионами Ar низкой энергии // Письма в Журнал технической физики. 2022. Т. 48. № 7. С. 16–19.

ОТ РАДИОХИМИЧЕСКОГО И ЯДЕРНО-ХИМИЧЕСКОГО УПРАВЛЕНИЯ (АВТО)КОЛЕБАТЕЛЬНЫМИ РЕАКЦИЯМИ К ЯДЕРНО-ХИМИЧЕСКИМ АНАЛОГОВЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ И НЕЙРОМОРФНЫМ СТРУКТУРАМ, ЧУВСТВИТЕЛЬНЫМ К ОБЛУЧЕНИЮ ЭЛЕМЕНТАРНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

О.В. Градов¹

¹Федеральный Исследовательский Центр Химической Физики им. Н.Н. Семенова РАН, Отдел динамики химических и биологических процессов, Москва, Россия

E-mail: gradov.chph.ras@gmail.com

Широко известны автоколебательные реакции, индуцируемые фотохимическим и радиохимическим путем. Так, в работах Л. Кунерта [1,2] описана фотоиндуцированная реакция Белоусова-Жаботинского с использованием рутениевого светочувствительного катализатора. Данное явление, получившее впоследствии название "оптохимического управления", заключается в формировании фазовой волны при переходе от темнового цикла реакции к стадии облучения.

В рамках реакционно-диффузионной модели явление оптохимического контроля возможно описать как смещение точки пересечения нуль-изоклин при сдвиге изоклины ингибитора под действием излучения. При определенной засветке эта точка переходит из области колебательного режима в область возбудимого и область ведущего центра.

Таким образом, возможно фотохимическое управление динамикой и реакционно-диффузионной кинетикой автоколебательных реакций. Однако спектральный диапазон эффективных воздействий на активную светочувствительную среду не ограничивается оптическим диапазоном, а зависит от спектральной сенсбилизации катализатора. Более того, номенклатура управляемых колебательных реакций также не ограничена средами реакции Белоусова-Жаботинского, поскольку существуют отличные от них активные среды с фотокатализаторами, обладающие чувствительностью в отличных спектральных областях. Известны техники управления колебательными реакциями с использованием электромагнитных сигналов вне оптического диапазона - от радиочастотного до ТГц [3], а также ядерно-химического управления - например, классические работы по действию альфа-частиц на формирование волновых фронтов в реакции Белоусова-Жаботинского [4-7]. В одних случаях облучение выполняет функцию "агента энергетической накачки" активной среды, а в других случаях - только управляет процессом (является триггером для запуска или пространственным модулятором химических градиентов, как в варианте Кунерта [1,2]).

На современных промышленных и экспериментальных установках (пример, для вышеуказанного случая облучения реакции Белоусова-Жаботинского альфа-частицами с энергией 30 МэВ - типа классических циклотронов, используемых также в биомедицине и биоматериаловедении, например для облучения липосом или мембраномиметиков [8]) можно достигать масштабирования подобных процессов управления путём организации правильной конфигурации мишени. Между тем, компартиментализация (разделение всего объёма реакции на облучаемые микроотсеки, например - те же липосомы и мембранные везикулярные структуры [8], в которых автоколебательные реакции типа БЖ ведут себя весьма экзотично [9,10]) позволяет рационально использовать пространство мишени для проведения взаимодействующих реакций в распределенной системе. Это позволяет ряду авторов использовать к подобным распределенным микросистемам взаимодействующих агентов биофизическую метафору "вычислений", "коннектомики" и нейромиметических либо нейроморфных механизмов [11-14] (вплоть до "искусственных интеллектуальных и автономных агентов" и "искусственного мозга" в последних работах отечественных, уже оторвавшихся от рефлексии западной школы авторов [15,16]). Однако никто до сих пор

не рассматривал варианты ядерно-химического контроля подобных нейромиметических вычислений (вместо оптохимического контроля) и роли облучения мембран в подобных распределенных системах при инициировании более комплексных аналоговых физико-химических вычислений (т.н. "membrane computing" vs. "cellular computing") при ядерно-индуцированных или радиохимически-индуцированных колебаниях в активной среде.

В данном докладе приводятся модельные данные, полученные в начале 2010-х гг., и ранние эмпирические данные, интерпретируемые в контексте аналоговых вычислений, имплементируемых с автографическим отображением на ядерной фотоэмульсии.

1. L. Kuhnert. A new optical photochemical memory device in a light-sensitive chemical active medium. *Nature*. 1986. V. 319. No. 6502, 393. <https://doi.org/10.1038/319393a0>
2. L. Kuhnert. Photochemische manipulation von chemischen wellen. *Naturwissenschaften*. 1986. V. 73. No. 2, 96.
3. D.A. Usanov, A.P. Rytik. Effect of electromagnetic radiation on the Belousov-Zhabotinsky oscillating reaction, *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2013. Т. 87. № 5. С. 872-875. V.M. Lebedev, A.B. Priselkova, A.V. Spassky, K.A. Trukhanov. Generation of leading centers in the Belousov-Zhabotinsky reaction by 30 MeV alpha beam. Preprint SINP MSU-2006-6/805.
4. D.N. Artamonov, A.B. Priselkova, A.V. Spassky, K.A. Trukhanov. Influence of Alpha-Beams with Energy of 30 MeV on Wave Propagation in the Belousov-Zhabotinsky Reaction // *AIP Conf. Proc.* V. 958. No. 1. 242-243. <https://doi.org/10.1063/1.2825798>
5. A.B. Priselkova, D.N. Artamonov, A.N. Ermakov, V.M. Lebedev, A.V. Spassky, K.A. Trukhanov, O.S. Kruglov. Generation of wave process in the Belousov-Zhabotinsky reaction by a 30-MeV collimated electron beam // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2008. V. 73. No. 4, 494-497. <https://doi.org/10.3103/S1062873809040133>
6. D.N. Artamonov, V.M. Lebedev, A.B. Priselkova, A.V. Spassky, K.A. Trukhanov, O.S. Kruglov. Influence of 30-MeV α -particle beams on wave propagation in the Belousov-Zhabotinsky reaction // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2008. V. 72. No. 7, 988-991. <https://doi.org/10.3103/S1062873808070307>
7. A.A. Baizhumanov, L.I. Deev, O.S. Kruglov, V.M. Lebedev, G.V. Maksimov, E.Y. Parshina, A.V. Spassky, K.A. Trukhanov. Using the U-120 cyclotron to study the effect of 30 MeV alpha particles on a liposome membrane // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2011. V. 75. No. 11, 1549-1551. <https://doi.org/10.3103/S1062873811040058>
8. M.S. Chern, Y. Okamoto, K. Suga, N. Watanabe, H. Umakoshi. Changes Caused by Liposomes to the Belousov-Zhabotinsky Reaction // *J. Phys. Chem. B*. 2020. V. 124. 9862-9869.
9. M.S. Chern, N. Watanabe, K. Suga, Y. Okamoto, H. Umakoshi. Modulation of the Belousov-Zhabotinsky Reaction with Lipid Bilayers: Effects of Lipid Head Groups and Membrane Properties // *Langmuir*, 2021. V. 37. No. 22, 6811-6818.
10. R. Tomasi, J.M. Noël, A. Zenati, S. Ristori, F. Rossi, V. Cabuil, F. Kanoufi, A. Abou-Hassan. Chemical communication between liposomes encapsulating a chemical oscillatory reaction // *Chemical Science*. 2014. V. 5. No. 5, 1854-1859.
11. F. Muzika, J. Górecki. Identification of the best medium for experiments on chemical computation with Belousov-Zhabotinsky reaction and ferriin-loaded Dowex beads // *Reac. Kinet. Mech. Cat.* 2022. V. 135, 1187-1209. <https://doi.org/10.1007/s11144-022-02171-4>
12. A. Adamatzky, C. Fullarton, N. Phillips, B. De Lacy Costello, T.C. Draper. Thermal switch of oscillation frequency in Belousov-Zhabotinsky liquid marbles // *RSOS*. 2019. V. 6, 190078.
13. F. Rossi, K. Torbensen, S. Ristori, A. Abou-Hassan. Signal transduction and communication through model membranes in networks of coupled chemical oscillators // *Comm. Comp. Inf. Sci.*, 2017. V. 830, 16-31. https://doi.org/10.1007/978-3-319-78658-2_2
14. I.L. Mallphanov, V.K. Vanag. Chemical micro-oscillators based on the Belousov-Zhabotinsky reaction // *Russian Chemical Reviews*. 2021. V. 90, 1263. <https://doi.org/10.1070/RCR5009>
15. V.K. Vanag. Networks of spike oscillators and their application for creating autonomous intelligent devices // *Phys. Usp.* 2022. V. 65, No. 5, 440-452

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТАНОВКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛЕРОДА В ПОЧВЕ

А.В. Андреев¹, Н.А. Фёдоров²

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия,

E-mail: andreev.av20@physics.msu.ru

Точное определение концентрации углерода в почве на сегодняшний день остаётся важной задачей для различных областей науки. Особая роль почвы в производстве продуктов питания, а также её участие в регулировании химического состава атмосферы заставляет всесторонне исследовать это особое тело природы [1]. Количественное измерение содержания углерода в почве даёт возможность определить её плодородие, а динамика изменения концентрации углерода может нести информацию о климатических изменениях в атмосфере.

Наиболее распространёнными способами определения концентрации углерода в почве, являются химические методы. Данные методы создают особые трудности в изготовлении образцов для исследования. На данный момент актуальными являются ядерно-физические методы исследования, например создание мобильных установок, основанных на нейтронном гамма-анализе, позволяющих определять концентрацию углерода в полевых условиях [2].

Данная работа посвящена компьютерному моделированию взаимодействия нейтронов с образцами почв, имеющих различную концентрацию углерода. Расчёт был проведен в пакете программ GEANT4 [3]. GEANT4 - инструментальный для моделирования прохождения элементарных частиц через вещество с использованием методов Монте-Карло, разработанный в CERN на объектно-ориентированном языке программирования C++ .

Схема рассматриваемой установки представлена на рис. 1. В качестве источника нейтронов использовался генератор ИНГ-27, испускающий нейтроны с энергией 14.1 МэВ, мишенью являлся кубический образец почвы размером 20×20×20 см, детектирующая система состояла из 20 сцинтилляционных детекторов гамма-квантов на основе германата висмута (детекторы BGO), расположенных по кругу с радиусом 45 см.

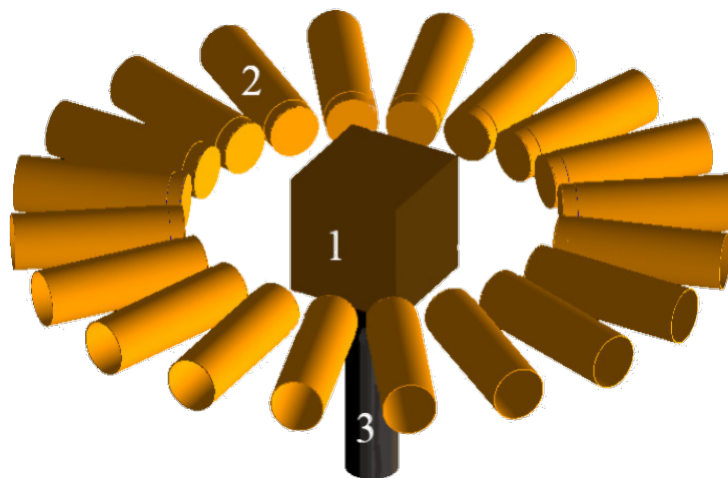


Рис. 1. Схема моделируемой установки.
1-образец, 2 - γ -детектор BGO, 3 – нейтронный генератор ИНГ-27

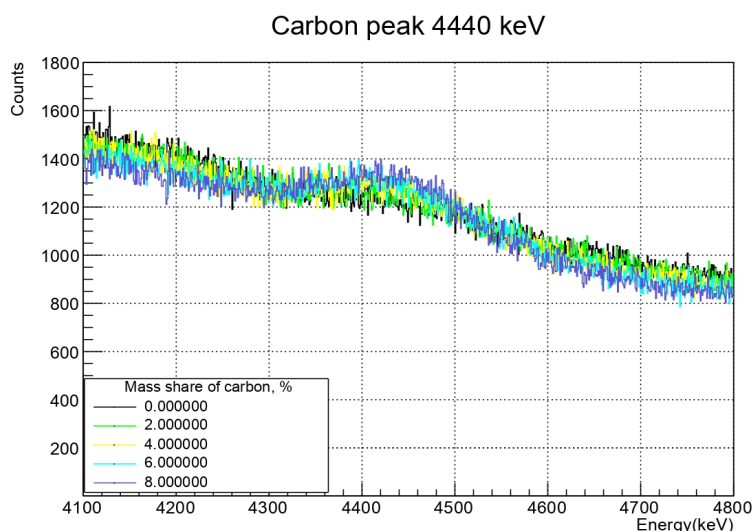


Рис. 2. Смоделированный гамма-спектр углеродного пика с энергией 4440 кэВ для различных концентраций.

При неупругом взаимодействии быстрых нейтронов с ядрами углерода ^{12}C излучаются γ -кванты энергии 4.44 МэВ, что позволяет определить концентрацию углерода по площади соответствующего γ -пика. На рис. 2 представлен смоделированный гамма-спектр углеродного пика с энергией 4440 кэВ для различных концентраций.

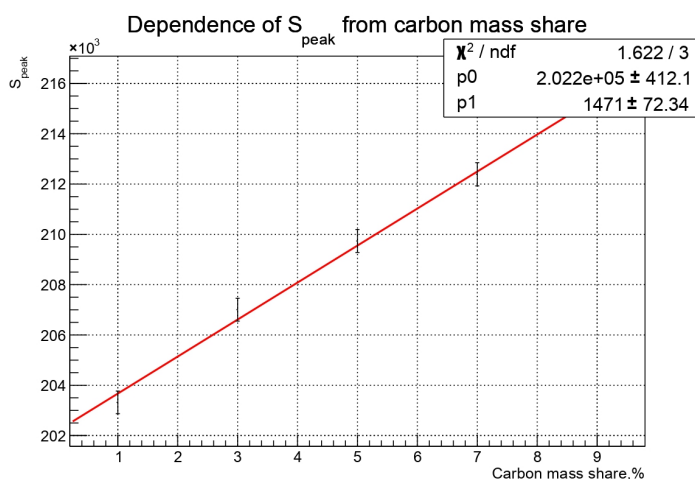


Рис. 3. Зависимость площади пика от концентрации углерода.

Оценки показали, что площадь γ -пика линейным образом зависит от концентраций углерода (Рис. 3), а модельный порог чувствительности рассмотренной установки составляет $0.6 \pm 1.0\%$.

1. A. Kavetskiy, G. Yakubova, S. A. Prior et al. Tagged neutron method for carbon analysis of large soil samples //Applied Radiation and Isotopes. 2019. V. 150, p. 127-134.
2. Почвоведение. Учеб. для ун-тов. В 2 ч./Под ред. В. А. Ковды, Б. Г. Розанова. Ч. 1. Почва и почвообразование/ Г. Д. Белицина и др. — М.: Высш. шк., 1988.
3. Geant4 version 10.01, patch 2. https://geant4.web.cern.ch/support/download_archive?page=3..

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ДИОКСИДА И ФОСФАТА ТОРИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ МЯГКОЙ ХИМИИ

Тетерин Ю.А.мл.^{1,2}, Плахова Т.В.¹, Светогоров Р.Д.², Тригуб А.Л.^{1,2}, Романчук А.Ю.¹, Калмыков С.Н.¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия,

²Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия

E-mail: iurii.teterin@chemistry.msu.ru

Торий является простейшим, с химической точки зрения, представителем ряда актинидов. Этот элемент не образует нестехиометричных оксидов и не чувствителен к окислительно-восстановительным процессам. Соединения тория могут быть использованы в качестве модельных для изучения процессов миграции более радиотоксичных четырехвалентных актинидов в окружающей среде. Миграционное поведение радионуклидов зачастую определяется их малорастворимыми формами. Оксиды и фосфаты тория являются термодинамически устойчивыми соединениями в широком диапазоне условий, близких к окружающей среде. Согласно литературным данным, в условиях мягкого химического осаждения торий образует рентгеноаморфный диоксид [1]. Для характеристики образцов, обладающих низкой кристалличностью, в дополнение к лабораторным методам анализа необходимо использовать синхротронные методы, чувствительные к дальнему и ближнему порядку. Целью данной работы стало исследование структуры диоксида и фосфата тория, полученных методами мягкой химии различными лабораторными и синхротронными методами.

В рамках работы были синтезированы образцы рентгеноаморфного ThO₂ (ThO₂(p/ам)), из которого, в последствии, были получены фосфаты тория. Образец ThO₂(p/ам) был синтезирован методом химического осаждением из раствора нитрата тория водным раствором аммиака. Для синтеза фосфата тория, часть образца ThO₂(p/ам) помещали в 1М натрий-фосфатный буфер с рН 4,6 и 7,6 на длительное время при 25°C. Другую часть подвергали гидротермальной обработке при 150°C в 1М и 0,1М фосфатном буфере в течение 2 – 6 дней. Физико-химические формы тория в растворе над осадком определяли методом спектроскопии рентгеновского поглощения (EXAFS). Для характеристики диоксида и фосфатов тория был использован метод рентгеновской дифракции (РФА, в том числе на синхротроне), EXAFS, просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения (ПЭМВР), а также термогравиметрия (ТГ).

В результате длительного старения ThO₂(p/ам) в фосфат-содержащих средах при комнатной температуре происходит постепенная перекристаллизация исходного диоксида. В условиях ТГ обработки количественное переформирование ThO₂(p/ам) в фосфат тория происходит гораздо быстрее. По данным РФА из ThO₂(p/ам) через 2 дня ТГ обработки в натрий-фосфатном буфере формируется фосфат тория состава Th_{0,5}NaPO₄. При этом фазовый состав зависит от значения рН фосфатного буфера. При рН 7,6 происходит формирование фазы грейита (гексагональная сингония), в то время как при рН 4,6 формируется фаза фосфата тория моноклинной сингонии. По данным ТГ фосфаты тория, полученные путем переформирования, являются термически устойчивыми до 650°C.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2021-1353

1. T.V. Plakhova et al. Size Effects in Nanocrystalline Thoria // J. Phys. Chem C 2019. V. 123, 23167

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ В ПОЛЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ: ПАРАМЕТРЫ АНИЗОТРОПИИ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ

М. М. Попова^{1,2}, Е. В. Грызлова¹, С. Н. Юдин¹, М. Д. Киселев^{1,2}, А. Н. Грум-Гржимайло¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: gryzlova@gmail.com

При взаимодействии электромагнитного излучения синхротронных источников с веществом запускается цепочка актов последовательного поглощения фотонов, как правило, приводящая к ионизации. Регистрация фотоэлектронных спектров позволяет извлечь большое количество информации о внутренних свойствах системы. При этом возможность получать спектры, разрешенные по углу, существенно увеличивает качество и количество данных о системе. Ранее мы сообщали о подходе, основанном на численном решении скоростных уравнений, для моделирования интегральных спектров фотоэлектронов при облучении атома неона комбинированным полем инфракрасного лазера и кратных ему высокочастотных гармоник, энергия которых соответствует характерным энергиям синхротронного излучения [1]. Описанный подход был расширен с помощью техник, описанных в [2], на получение разрешенных по углу спектров и применен для описания этой же системы. Для верификации результатов также использовалась теория возмущений (ТВ).

Если ионизирующее поле линейно поляризовано (что характерно для излучения синхротронных источников), то в системе координат, в которой ось z сонаправлена с вектором поляризации поля, угловую анизотропию фотоэлектронных спектров, можно описать с помощью параметров угловой анизотропии β_2 и β_4 :

$$W(E; \theta) = \frac{\sigma(E)}{4\pi} \cdot (1 + \beta_2(E)P_2(\cos \theta) + \beta_4(E)P_4(\cos \theta)),$$

где $\sigma(E)$ — усредненный по углу спектр фотоэлектронов, а P_2 и P_4 — второй и четвертый полиномы Лежандра, соответственно.

На Рис. 1 представлен расчет усредненного спектра и параметров угловой анизотропии в теории возмущений для атома неона находящегося в комбинированном поле инфракрасного лазера с длиной волны 800 нм и его 13–17 гармоник для параметров импульса, характерных для современных исследований: интенсивности порядка 10^{12} (для гармоник $0.5 \cdot 10^9$) Вт/см² и длины импульса 20 (10) фс. Расчет усредненного спектра, проведенный методом решения скоростных уравнений, находится в полном согласии с результатами, полученными в рамках ТВ.

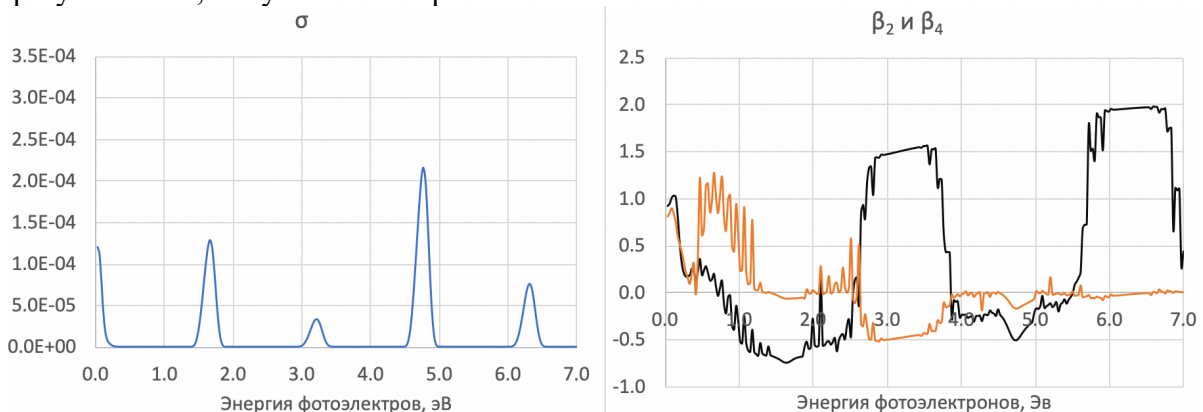


Рис. 1. Усредненный спектр фотоэлектронов (слева) и параметры угловой анизотропии (справа, черная линия — β_2 , синяя линия — β_4).

Как видно из результатов моделирования, безразмерные параметры β_2 и β_4 являются достаточно большими, что говорит о сильной угловой анизотропии фотоэлектронных спектров.

Все авторы благодарят Министерство науки и высшего образования РФ, грант No. 075-15-2021-1353 и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) № 20-52-12023

1. Е. В. Грызлова, М. М. Попова, М. Д. Киселев и др. // Исследование эволюции состояния квантовых систем в поле синхротронного излучения методами численного моделирования. Сборник тезисов докладов XXII межвузовской молодежной научной школы-конференции имени б. С. Ишханова концентрированные потоки энергии в космической технике электронике, экологии и медицине 22-23 ноября 2021 г. — 2021. — С. 140–141.
2. V.V. Balashov, A.N. Grum-Grzhimailo. Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions. A Practical Theory Course. - NY.: Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2000

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗАКРУЧЕННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С АТОМОМ ГЕЛИЯ В ОБЛАСТИ НИЗШИХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ

М. Д. Киселев^{1,2,3}, А. Н. Грум-Гржимайло^{2,3}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

³Университет ИТМО
School of Physics and Engineering,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: md.kiselev94@gmail.com

С появлением нового поколения источников когерентного излучения видимого и ультрафиолетового диапазонов исследования недипольных эффектов в атомной фотоионизации привлекают в настоящее время большое внимание как в эксперименте, так и в теории. Особый интерес к этим исследованиям вызывают энергии фотонов вблизи так называемого куперовского минимума и в области автоионизационных резонансов соответствующего профиля, где электрический дипольный (E1) матричный элемент может стать сравнимым и даже меньше, чем амплитуды фотоионизации более высокого порядка (E2, M1, ...). Это позволяет исследовать недипольные эффекты при ионизации атомов низкоэнергетическими фотонами с энергиями всего в несколько эВ. Такие недипольные эффекты становятся наиболее заметными при анализе углового распределения и/или поляризации фотоэлектронов, вылетающих из неполяризованных, а также поляризованных атомов.

До сих пор теоретические и экспериментальные исследования недипольных эффектов в атомной фотоионизации проводились для обычного плосковолнового излучения. Однако, можно ожидать, что недипольные вклады в угловые и поляризационно-разрешённые фотоионизационные свойства будут улучшены, если атомная мишень подвергается воздействию закрученного света. Такое усиление будет вызвано взаимодействием между:

(1) эффектами атомной структуры (т.е. энергетической зависимостью мультипольных амплитуд)

и

(2) сложной внутренней структурой закрученных световых пучков (в основном неоднородный профиль интенсивности).

Поэтому целью настоящей работы является построение и использование математической модели для описания угловых распределений фотоэлектронов, образующихся в процессе взаимодействия закрученного излучения с атомом гелия в области энергий фотонов, содержащей квадрупольный $2p^2[{}^1D_2]$ и дипольный $2s2p[{}^1P_1]$ автоионизационные резонансы атома гелия. Теоретический анализ будет выполнен для экспериментально значимого случая макроскопических атомных мишеней, когда площадь поперечного сечения мишени больше характерного поперечного размера закрученного пучка.

Подготовка волновых функций системы в начальном и конечном состояниях проводилась многоконфигурационным методом Хартри-Фока (MCHF) [1]. Амплитуды плосковолновой фотоионизации рассчитаны в рамках метода R-матрицы с B-сплайнами (BSR) [2].

Сечения дипольной и квадрупольной фотоионизации атома гелия в интересующей области энергий фотона представлены на рис. 1 вместе с недипольным параметром γ [3], восстановленным из амплитуд фотоионизации.

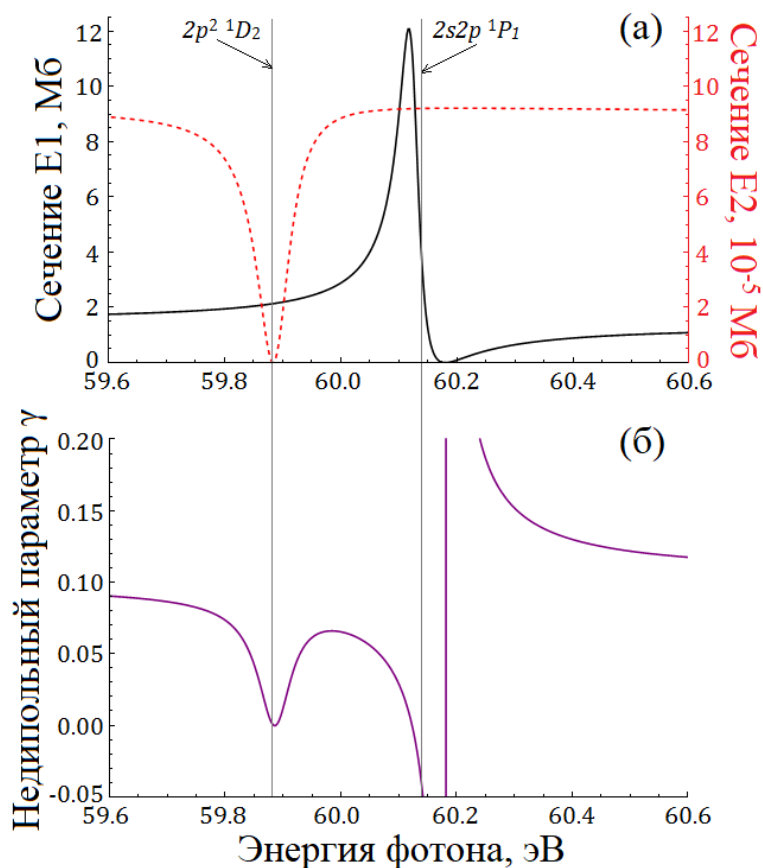


Рис. 1. (а) сечения фотоионизации основного состояния нейтрального атома гелия под действием дипольного (E1) фотона (чёрный цвет) и квадрупольного (E2) фотона (красный пунктир) в области низших автоионизационных квадрупольного $2p^2[{}^1D_2]$ и дипольного $2s2p[{}^1P_1]$ резонансов; (б) недипольный параметр γ в той же области энергий фотона.

Результаты и анализ угловых распределений фотоэлектронов под действием закрученного излучения будут представлены на конференции. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (РНФ) в рамках проекта №21-42-04412.

1. C. Froese Fischer, T. Brage, P. Jönsson. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // Institute of Physics Publishing (Bristol, UK, 1997).
2. O. Zatsarinny. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // Comp. Phys. Comm. 2006. V. 174, 273-356.
3. J. W. Cooper. Multipole corrections to the angular distribution of photoelectrons at low energies // Phys. Rev. A 1990. V. 42, 6942.

КОНКУРЕНЦИЯ ФОТОИОНИЗАЦИОННЫХ И РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В МАЛЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е. В. Грызлова¹, М. М. Попова^{1,2}, С. Н. Юдин¹, М. Д. Киселев^{1,2}, А. Н. Грум-Гржимайло¹

¹*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,*

²*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия*

E-mail: gryzlova@gmail.com

При взаимодействии излучения диапазона вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгена, генерируемого синхротронными источниками, доминирующим процессом является фотоэффект. При этом чаще всего происходит ионизация из внутренней оболочки атома или молекулы, так как вероятность фотоионизации валентных оболочек быстро падает с ростом энергии фотона. После этого запускается цепочка релаксационных процессов, таких как флуоресценция, Оже-распад, диссоциация, и, наконец, кулоновский взрыв молекулы. При этом энергия испущенного электрона, как фотоэлектрона, так и Оже-электрона, зависит от состояния системы в целом. Например, при ионизации молекулы СО энергия электрона, вылетевшего с 1s оболочки углерода, зависит от того, ионизирован ли кислород или еще нет. Таким образом, речь идет о сложной динамической конкуренции между различными процессами.

Для описания этой эволюции хорошо подходит решение системы уравнений заселенности [1]. Если система находится в состоянии a и под действием излучения переходит в состояние b , то изменение состояний описывается системой уравнений

$$\begin{aligned}\frac{dN_a}{dt} &= -I(t)\sigma_{ab}N_a; \\ \frac{dN_b}{dt} &= I(t)\sigma_{ab}N_a,\end{aligned}$$

здесь $I(t)$ - интенсивность синхротронного излучения как функция времени, σ_{ab} - сечение фотопроцесса. Если два состояния связаны релаксационным, то есть спонтанным процессом, то эта часть системы не зависит от облучающего поля:

$$\begin{aligned}\frac{dN_a}{dt} &= -w_{ab}N_a; \\ \frac{dN_b}{dt} &= w_{ab}N_a,\end{aligned}$$

Таким образом, результирующая система имеет вид:

$$\frac{dN_a}{dt} = -I(t) \sum_{b \neq a} \sigma_{ab} N_a - \sum_{b \neq a} w_{ab} N_a.$$

Мы реализовали решение этой системы уравнений заселенности с сечениями ионизации и вероятностями рапидов, рассматриваемыми как внешние параметры. Спектры фотоэлектронов зависят не от конечного состояния системы, а от того, какие цепочки конкурирующих процессов привели к данному состоянию. Определив такую накопленную вероятность за время эволюции образца P_{ab} , можно сгенерировать спектр электронов как функцию

$$W(\varepsilon) = \sum_{a,b} P_{ab} \exp\left(-\frac{(E_b - E_a - \varepsilon)^2}{\Gamma^2}\right),$$

где Γ играет роль разрешающей способности детектора.

Мы применили метод к описанию эволюции атома неона и некоторых гетероядерных двухатомных молекул.

На Рис. 1 представлен расчет эволюции неона, протекающей под действием источника средней, низкой и высокой интенсивности. Видно, что при одном и том же числе фотонов для длинного импульса, соответствующего меньшей интенсивности, доминируют однократные ионы и продукты их распада, а для короткого – двукратные ионы и продукты из распада.

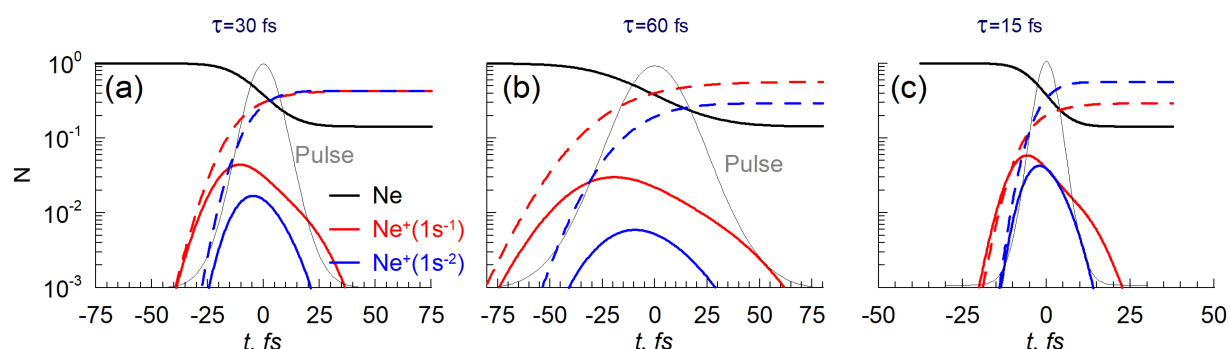


Рис. 1. Выход нейтральных атомов Ne (черная линия), однократных ионов Ne^+ с вакансией в 1s-оболочке и продуктов их распада (красные сплошные и пунктирные линии, соответственно), двукратных ионов Ne^{2+} с двойной вакансией в 1s-оболочке (синие сплошные и пунктирные линии, соответственно). Поток фотонов за импульс $1000\text{ph}/\text{A}^2$, энергия фотонов настроена в резонанс с $1s \rightarrow 3p$ переходом в ионе неона $\text{Ne}^+ 1s2s^22p^6$.

Все авторы благодарят Министерство науки и высшего образования РФ, грант No. 075-15-2021-1353 и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) No 20-52-12023

1. Elena V. Gryzlova, Maksim D. Kiselev, Maria M. Popova, Anton A. Zubekhin, Giuseppe Sansone and Alexei N. Grum-Grzhimailo. *Atoms*, **8**, 80 (2020).

ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ Pu(VI)

А.С. Кузенкова¹, А.Ю. Романчук¹, Р.Д. Светогоров², А.Л. Тригуб², С.Н. Калмыков¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия,

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: kuznastyaya@mail.ru

Плутоний – один из самых сложных для изучения элементов, так как он может присутствовать в растворе одновременно в нескольких степенях окисления, причём химическое поведение каждой из них отличается. В литературе большое внимание уделялось поведению Pu(IV) в разных средах и очень мало изучался плутоний в окисленных формах. Одна из работ, посвящённая поведению Pu(VI) - статья Квашниной с соавторами¹. В ней рассматривался вопрос образования наночастиц PuO₂ из растворов Pu(VI) путём добавления аммиака в условиях присутствия карбонатов. Отмечалось, что при осаждении происходит формирование и последующее растворение метастабильной фазы пятивалентного плутония NH₄PuO₂CO₃. Интересно отметить, что впервые аналогичная структура карбонатов Pu(V) была описана Эллингером и Захариасеном в 1954 году² по результатам порошковой дифракции. Ницше с соавторами³ даже наблюдал формирование фаз состава NaPuO₂CO₃ из Pu(V) и Pu(VI) в растворах, имитирующих природные подземные воды, что поднимает вопрос о возможном стабильном существовании подобных тройных карбонатов. Однако, несмотря на возможность образования представленных твёрдых фаз Pu(V) в условиях окружающей среды, в литературе до сих пор нет единого понимания о свойствах и термодинамической устойчивости данных соединений.

В рамках данной работы поведение Pu(VI) изучалось в водных растворах на воздухе в диапазоне pH от 2 до 12. Было приготовлено несколько растворов с начальной концентрацией Pu(VI) = 10⁻⁴М с использованием NaOH для корректировки pH. В течение эксперимента контролировалась степень осаждения плутоний-содержащих фаз, а также изменение pH и Eh растворов. Кроме того, определение степеней окисления Pu в растворе проводилось методом жидкостной экстракции (Д2ЭГФК) и спектрофотометрии. Образовавшиеся твёрдые фазы были характеризованы рентгенофазовым анализом (РФА) и спектроскопией рентгеновского поглощения (XANES, EXAFS) с применением синхротронных источников, а также просвечивающей электронной микроскопией высокого разрешения (ПЭМВР).

Из всех растворов Pu(VI) наблюдалось медленное восстановление и осаждение плутония из раствора. Однако, при pH = 6 – 10 в течение 10 – 30 дней наблюдалось последующее растворение и переформирование твёрдой фазы с образованием наночастиц PuO₂, что было подтверждено при помощи РФА, ПЭМВР и спектроскопии рентгеновского поглощения.

Из растворов с высоким значением окислительно-восстановительного потенциала (0,6 – 0,8 В) при pH=8 наблюдалось образовывание устойчивой твёрдой фазы, которая была охарактеризована при помощи РФА как карбонат плутония предположительного состава NaPuO₂CO₃. Данная твёрдая фаза кристаллизуется в виде крупных гексагональных кристаллов размером ~1 мкм. Карбонат Pu(V) был повторно получен различными методами при pH=8 и pH=10, при этом в некоторых соединениях наблюдалась примесь PuO₂. Параметры решётки полученных твёрдых фаз уточнялись по порошковой дифракции по методу Ритвельда.

Благодаря спектроскопии рентгеновского поглощения с применением синхротронных источников удалось установить, что в твёрдой фазе плутоний присутствует преимущественно в пятивалентной форме (XANES спектроскопия). При моделировании полученных спектров EXAFS удалось описать локальное окружение плутония в структуре карбоната. Было обнаружено, что расстояние между плутонием и кислородом в аксиальной плоскости в структуре плутонила PuO_2^+ равно 1,81 Å, что значительно отличается от значений 1,94 Å, рассчитанных по порошковой дифракции Эллингером и Захариасеном⁴.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-73-10056.

- [1] Kristina O. Kvashnina et al. *Angewandte Chemie* 58(49) (2019) 17558 – 17562.
- [2] F.H. Ellinger and W.H. Zachariasen. *The Journal of Physical Chemistry* 58(5) (1954) 405-408.
- [3] Heino Nitsche et al. *Radiochimica Acta* 66/67 (1994) 3 – 8.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДЛОЖКИ НА ПРОЦЕСС ЛАЗЕРНОГО НАНЕСЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНО ГРАДИЕНТНЫХ КОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ INCONEL625/WC

Р.И. Воронин, М.Д. Хоменко

*Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН - филиал ФНИЦ
"Кристаллография и Фотоника" РАН, Шатура, Россия*

E-mail: hmd@laser.ru

Использование высокотемпературных композитных материалов – это путь к повышению эффективности создания деталей для аэрокосмической, энергетической и химической промышленности. Композитные материалы с металлической матрицей позволяют объединить свойства металлов и керамики для получения улучшенных характеристик детали с точки зрения коррозии, окисления, эрозии и высокой износостойкости [1]. Аддитивное производство (АП) позволяет создавать детали с перспективными свойствами путем сплавления материалов “in-situ” т.е. во время процесса производства [2]. Для получения высококачественного конечного изделия необходим оптимальный набор условий проведения процесса, требующий затратного и трудоемкого эмпирического подбора технологических параметров. Окно оптимальных параметров процесса нанесения материалов еще больше сужается при использовании разнородных материалов, однако позволяет получать покрытия с уникальными свойствами. Прямое численное моделирование является эффективным инструментом для сокращения экспериментальной работы, необходимой для оптимизации этой сложной технологии. Численные расчеты имеют огромное значение, так как позволяют заглянуть внутрь процессов, куда экспериментальными методами добраться очень сложно.

В данной работе проведены расчеты процессов в лазерном нанесении металла при создании тонкой стенки из композитного материала Inconel625/WC. Используется разработанная ранее гидродинамическая модель [3], а параметры сканирования соответствуют экспериментальным данным [4]. Исследуется процесс переноса примеси и преципитации WC в жидкой ванне расплава из Inconel 625 при различных значениях температуры предварительного нагрева подложки. Считается, что равновесная концентрация равна 10%.

На рисунках 1,2 показаны рассчитанные значения распределения размера преципитатов и концентрации растворенной примеси в поперечном разрезе тонкой стенки для двух значений температуры подложки. Видно, что тонкие стенки имеют практически идентичную высоту, однако ширина стенки несколько увеличивается при увеличении температуры подложки. Модель также показывает идентичную глубину проплавления для разных температур нагрева подложки.

Повышение температуры предварительного нагрева показывает небольшое увеличение радиуса преципитатов (рис. 1 а, б). Видно, что WC выпадает в осадок только в наиболее поздних дорожках, где подача WC была максимальной вне зависимости от температуры нагрева подложки. Растворенный WC рассеивается по всем слоям за счет гидродинамического перемешивания, а концентрация растворенного вещества становится несколько более равновесной при повышении температуры предварительного нагрева (рис. 2 а, б).

Проведено численное исследование лазерного нанесения тонкой стенки из композитного материала Inconel625/WC. Показано, что повышение температуры нагрева приближает концентрацию растворенного WC к равновесной. Это, по-видимому, связано с увеличенным временем жизни ванны расплава, достаточного для выпадения в осадок концентрации примеси, которая выше равновесной. В дальнейшем планируется сравнение полученных данных с экспериментальным исследованием, а также исследование влияния других параметров нанесения.

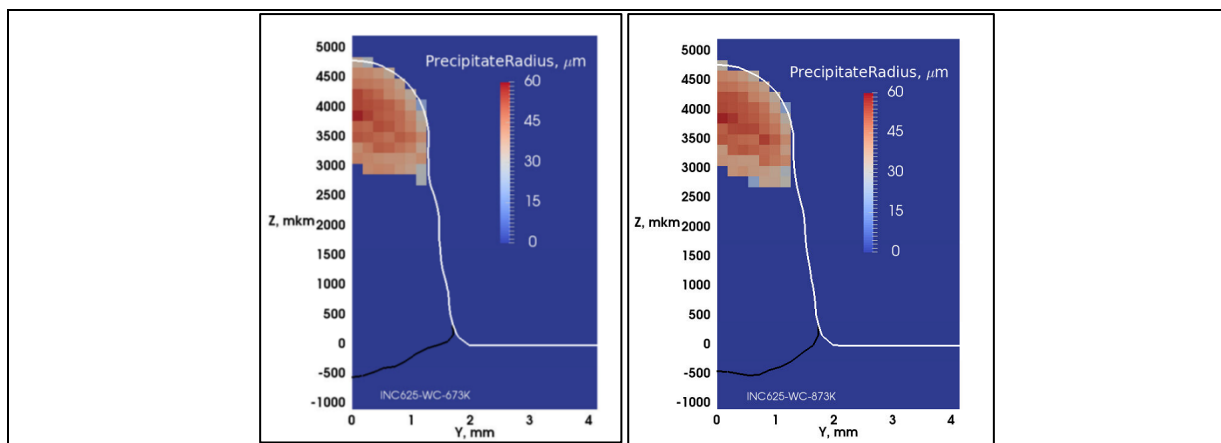


Рисунок 1. Распределение размера precipитатов для двух значений нагрева подложки

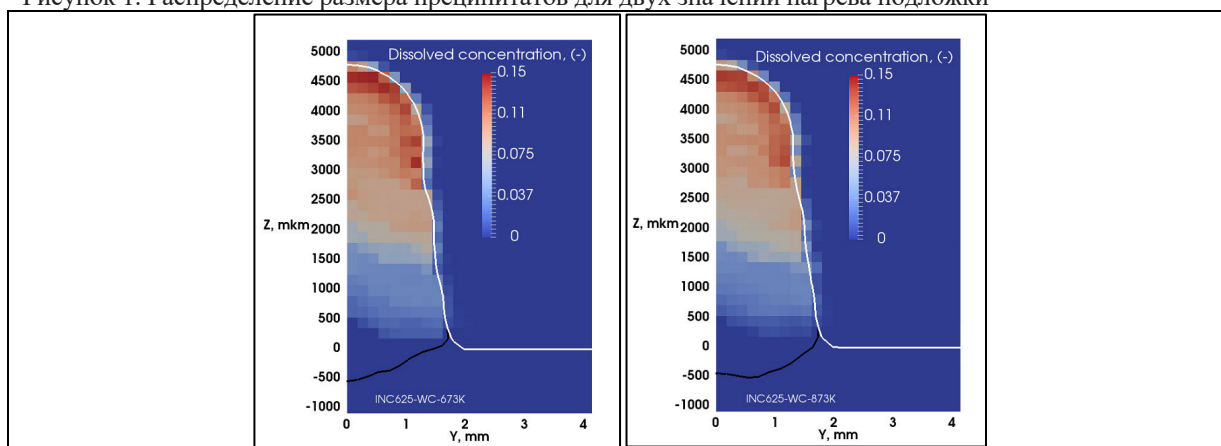


Рисунок 2. Распределение концентрации растворенной примеси для двух значений нагрева подложки

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

1. Huebner, J., Kata, D., Rutkowski, P., Petrzak, P., & Kusiński, J., "Grain-boundary interaction between Inconel 625 and WC during laser metal deposition" // *Materials*, Vol. 11(10), 2018, 1797.
2. He, S., Park, S., Shim, D. S., Yao, C., Zhang, W. J.. "Study on microstructure and abrasive behaviors of Inconel 718-WC composite coating fabricated by laser directed energy deposition" // *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.10.088
3. Khomenko M.D., Makoana W., Mirzade F.K., Pityana S., "Coupled heat transfer, fluid flow and solidification kinetics for laser additive manufacturing applications" // *Journal of manufacturing processes*, Vol. 67, 2021. pp. 611-618.
4. Olakanmi, E. O., Khomenko, M., Lindsay, E., Akintunde, I., Masina, B., Skhosane, N. Arthur, M. Tlotleng, S., Pityana, S., "Numerical Simulation and Experimental Validation of Solidification Phenomena in Functionally Graded Inconel625/WC Composite Coatings Fabricated with Laser Metal Deposition", // In Conference Proceedings «International Conference on Advanced Laser Technologies (ALT)» No. 22, 2022, pp. 51-51.

РАЗРАБОТКА КРИОСТАТА ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА РЕФЛЕКТОМЕТРЕ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ РЕМУР

А. Н. Черников¹, В. Д. Жакетов^{1,2}, К. Храдко¹, Ю. Н. Хайдуков², А. П. Буздавин¹,
А. В. Петренко¹, Ю. В. Никитенко¹

¹Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: zhaketov@nf.jinr.ru

Низкоразмерные магнитные и сверхпроводящие гетероструктуры, благодаря наличию большого количества интересных явлений активно исследуются в настоящее время. Одним из эффективных методов исследования магнетизма является рефлектометрия поляризованных нейтронов, позволяющая получить изотопные и магнитные профили по глубине с нанометровым разрешением. Рефлектометр поляризованных нейтронов РЕМУР, располагающийся на 8м канале импульсного реактора ИБР-2 (Дубна), является одним из наиболее светосильных рефлектометров в мире с потоком нейтронов на образце $\Phi = 3 \cdot 10^5 \text{ н} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-2}$. Данный рефлектометр является времяпролётным с рабочим диапазоном длины волны нейтрона $\sim 1\text{-}15 \text{ \AA}$. Особенностью данного рефлектометра является то, что на нём реализована мода регистрации вторичного излучения: заряженных частиц, гамма-квантов, а также нейтронов с переворотом спина. Регистрация вторичного излучения различного типа позволяет определять пространственный профиль отдельных изотопов [1,2]. На рефлектометре РЕМУР проводились низкотемпературные исследования эффектов близости в сверхпроводяще-ферромагнитных системах [3-6] и редкоземельных пленках с нетривиальным магнитным упорядочением [7].

Для расширения возможностей экспериментального метода в ЛНФ ОИЯИ разрабатывается новый криостат. Требования к криостату сводятся к достижению минимальной температуры $T = 0.5 \text{ К}$, максимального значения магнитного поля $H = 3 \text{ Тл}$, наличию опции регистрации вторичного излучения в виде гамма-квантов и режиму работы в замкнутом цикле. Актуальность получения температур $T < 1 \text{ К}$ связана, в частности, с исследованием гетероструктур актинидных соединений, в которых наблюдаются фазовые переходы в данном диапазоне температур [8]. Для получения таких температур в разрабатываемом криостате используется вставка с сжиженным ^3He . Для создания магнитного поля используется векторный криомагнит, изготовленный из ВТСП-ленты, состоящий из двух пар катушек.

1. В.Д. Жакетов и др. // Поверхность, № 6, стр. 10-24 (2021)
2. В.Д. Жакетов и др. // Поверхность, № 6, стр. 1-11 (2019)
3. В.Д. Жакетов и др. // ЖЭТФ, том 156, вып. 2(8), стр. 310-330 (2019)
4. В.Д. Жакетов и др. // ЖЭТФ, том 152, вып. 3(9), стр. 565-580 (2017)
5. Yu.N. Khaydukov et al. // Phys. Rev. B, 99, 140503(R) (2019)
6. Yu.N. Khaydukov et al. // Phys. Rev. B, 97, 144511 (2018)
7. Д.И. Девятериков и др. // Поверхность, № 10, стр. 24-28 (2022)
8. D. Aoki et al. // Journal of the Physical Society of Japan 88, 022001 (2019)

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА В МАТРИЦЕ КАЛИЕВО-АЛЮМОБОРАТНЫХ СТЕКОЛ, ПОДВЕРЖЕННЫХ ТЕРМОРАДИАЦИОННОМУ ВОЗДЕЙСТВИЮ

Ю.А. Алехина¹, Е.А. Фадеев², Е.М. Ибрагимова³, О.К.Кувандиков⁴,
М. К. Салахитдинова⁴, А.Б. Грановский¹, Н.С. Перов¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Технологический Университет Лаппеенранты, Лаппеенранта. Финляндия,

³Институт ядерной физики АН Республики Узбекистан, Ташкент. Узбекистан,

⁴Самаркандский государственный университет, Самарканд, Узбекистан

E-mail: ya.alekhina@physics.msu.ru

Калиевоалюмоборатные стекла (КАБ-стекла) с добавками оксида железа являются радиационно-оптическими материалами, перспективными для использования в приборах и устройствах, работающих в мощных радиационных полях и различных экстремальных условиях. Добавление оксидов железа наряду с окрашиванием стекол приводит к их большей радиационной устойчивости и делает их магнитоактивными, в частности приводит к возможности использования магнитооптических свойств. Выполненные недавно структурные исследования показали, что в таких стеклах преимущественно образуются наночастицы Fe_2O_3 с широкой дисперсией по размерам частиц, тогда как доля FeO и Fe_3O_4 незначительна. Наночастицы Fe_2O_3 , FeO и Fe_3O_4 в зависимости от их концентрации, размера и радиационного воздействия могут находиться в стеклах в различных магнитных состояниях (от парамагнитного и суперпарамагнитного до ферромагнитного и антиферромагнитного). В докладе представлены результаты исследования магнитных свойств стекол состава $\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{B}_2\text{O}_3$ (КАБ) без добавок Fe_2O_3 и с добавками Fe_2O_3 до 3.0 масс.%, подвергнутых радиационной и терморadiационной обработке в гамма-поле ^{60}Co .

Варка стекол проводилась при температуре 1603 ± 5 К в лабораторных условиях из химически чистых реактивов. Образцы изготавливали в форме пластин площадью 1 см^2 и толщиной 1 ± 0.05 мм. Радиационная обработка при комнатной температуре и терморadiационная обработка при температуре облучения образцов 423 К проводились внутри гамма-поля ^{60}Co при мощности излучения 236 Р/С в течение 2 часов. Исследование магнитных свойств наночастиц проводили с помощью СКВИД-магнитометра Quantum Design, MPMS 5XL при 4.2-400 К в полях до 4 Тл. Магнитные свойства изучались для образцов четырех типов. Образцы первого типа (N1) представляли собой исходные стекла без оксидов железа. Образцы N2 и N3 содержали 2 масс. % Fe_2O_3 и подвергались радиационному и терморadiационному воздействию при указанных выше условиях, соответственно. Образцы N4 содержали 3 масс. % Fe_2O_3 и облучались гамма-лучами при комнатной температуре.

На Рис. 1 представлены зависимости намагниченности образцов N1-N4 от приложенного магнитного поля до 1000 Гс при 5К. Намагниченность стекол, содержащих оксиды железа, практически линейно зависит от поля, наклон кривых растет с увеличением содержания Fe_2O_3 , а магнитный гистерезис удается выделить только на начальном участке кривых. Это поведение указывает, на то, что в основном имеет место парамагнитный отклик и незначительный ферромагнитный вклад. Так как коэрцитивная сила не превышает 4 Гс, то ферромагнитный отклик вероятно связан с нескомпенсированным антиферромагнетизмом наночастиц $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, который возник за

счет нескомпенсированных спинов на поверхности частиц или дефектов. Коэрцитивная сила частиц Fe_3O_4 и $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ на порядки величины больше, и поэтому даже их малое количество, по структурным данным не превышающее 2-3%, не может привести к наблюдаемому виду петли гистерезиса. Парамагнитный отклик связан как с диссоциированными в матрице ионами железа, которые возникли в результате радиационного воздействия, а также с теми же нескомпенсированными магнитными моментами наночастиц $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Возможная роль суперпарамагнитных частиц $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и Fe_3O_4 маловероятна, так как наши измерения намагниченности в слабых полях в режимах ZFC и FC не выявили температуру блокировки вплоть до 4.2 К.

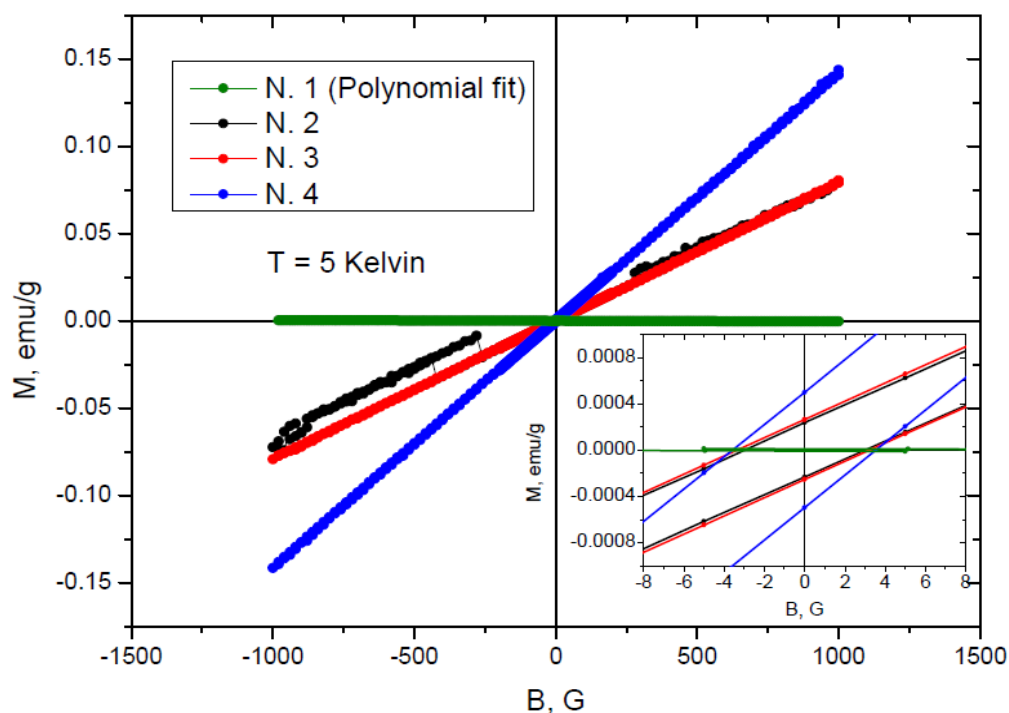


Рис1. Полевые зависимости намагниченности КАБ стекол при 5 К.

Кривые намагничивания образцов N2 и N3 практически совпадают, то есть терморadiационное воздействие при 423 К не приводит к дополнительным изменениям магнитных свойств по сравнению с радиационным воздействием.

Парамагнитный отклик подтверждается измерениями магнитной восприимчивости χ в слабых полях. Восприимчивость подчиняется закону Кюри-Вейсса:

$$\chi = C / (T - \theta)$$

с положительным значением температуры θ . Слабое отклонение от линейной зависимости $\chi^{-1}(T)$ имеет место при $T > 200$ К. Увеличение наклона кривой при $T > 200$ К, то есть уменьшение величины температуры отсечки θ , свидетельствует об уменьшении ферромагнитного взаимодействия между магнитными моментами при повышении температуры.

Обсуждается возможность использования магнитных измерений для контроля радиационного воздействия на микроструктуру стекол, а также изменения магнитных свойств наночастиц при радиационном воздействии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант No. 075-15-2021-1353)

ВИСМУТИДЫ – АНАЛОГИ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ СЕМЕЙСТВА 122

Шилов А.И.^{1,2}, Рахманов Е.О.¹, Перваков К.С.², Морозов И.В.¹.

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия,

²Физический институт академии наук им. П.Н. Лебедева, Москва, Россия

E-mail: TANKNBP@live.com

Открытие железосодержащих сверхпроводников [1] стимулировало интерес исследователей к слоистым пниктидным системам, которые проявляют не только сверхпроводящие, но и различные магнитные и электронные свойства [2-4]. Тяжёлые аналоги мышьяка, в частности – висмут, представляют интерес с точки зрения значительного вклада спин-орбитального взаимодействия в электронное строение этих соединений. В ходе нашей работы нами впервые были синтезированы висмутиды – аналоги железосодержащих сверхпроводников семейства 122 – ATM_2Bi_2 ($A = K, Rb, Cs$; $TM = Zn, Cd$). Исследования кристаллической структуры показали значительное различие между веществами, содержащими цинк и кадмий – соединения с цинком имеют значительно большее межслоевое расстояние, что вкпе с нечётным (15) количеством электронов на формульную единицу, позволило предположить наличие интересных электронных свойств в кадмиевых соединениях из-за взаимодействия антифлюоритоподобных слоёв [CdBi], структура этих соединений показана на Рис. 1.

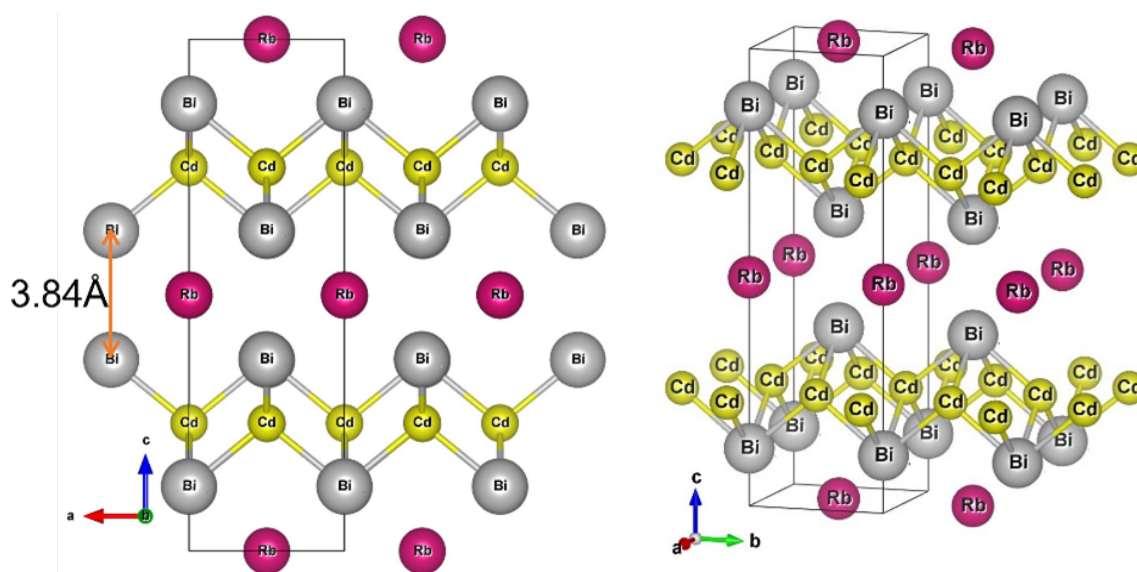


Рис. 1 Кристаллическое строение RbCd₂Bi₂

Кристаллы этих соединений были получены из расплава собственных компонентов с соотношением реагентов $A:TM:Bi = 2:3:4$. Реагенты помещали в алундовый тигель и заваривали в герметичный ниобиевый контейнер в атмосфере аргона. Полученные пластинчатые кристаллы отделяли от флюса механически. Эти соединения быстро деградируют на воздухе, поэтому проведение транспортных измерений, которые обычно используют для идентификации различных электронных свойств, таких как волны зарядовой плотности, оказывается значительно осложнено, поскольку необходимо монтировать контакты на кристалл в условиях сухого аргонового бокса. Для таких соединений измерение магнитной восприимчивости и фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES) могут быть использованы в качестве скрининговых методов для отбора соединений-кандидатов для проведения транспортных измерений.

Проведённые магнитные и ARPES измерения показали аномальный рост мнимой

части магнитной восприимчивости и наличие теневых зон (“shadow bands”), что свидетельствует о наличии изменений в электронной структуре при низкой температуре, таких как возникновение волн зарядовой плотности. Результаты проведенных измерений представлены на Рис. 2. Следует отметить определенное сходство полученных ARPES спектров висмутидов семейства 122 со спектрами Cu-содержащих ВТСП. В настоящее время решается задача проведения транспортных измерений и подробного исследования зонной структуры методом ARPES.

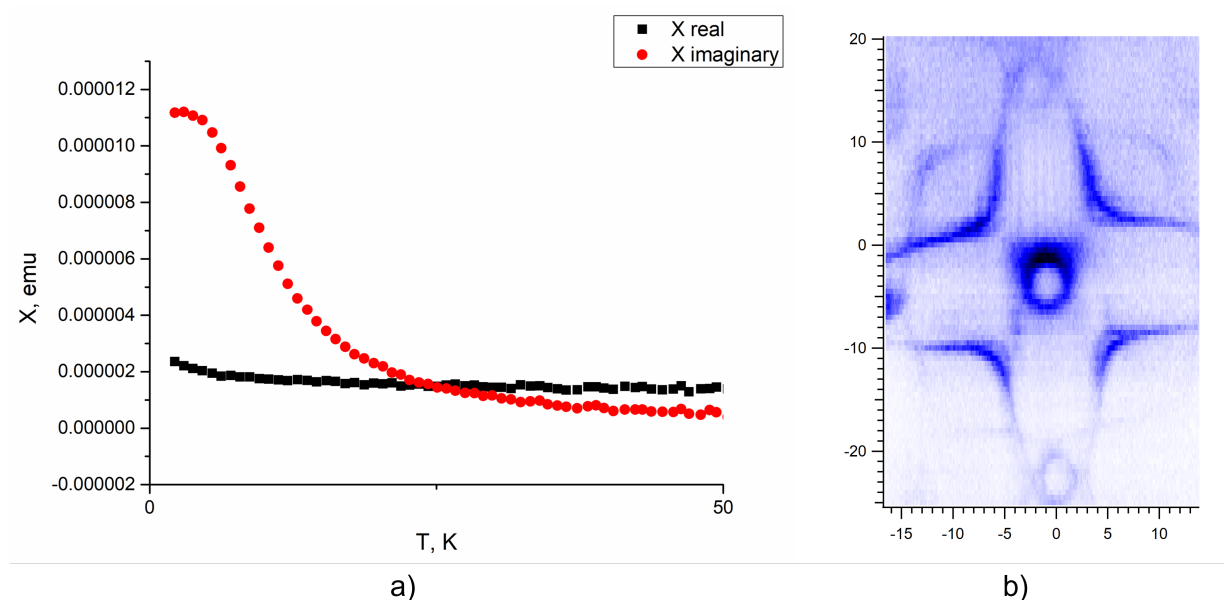


Рис. 2 Результаты измерения магнитной восприимчивости (a) и ARPES (b).

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2021-1353

1. Kamihara Y. et al. Iron-based layered superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x=0.05-0.12$) with $T_c=26$ K // *Journal of the American Chemical Society*. – 2008. – Т. 130. – №. 11. – С. 3296-3297.
2. de La Cruz C. et al. Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ systems // *nature*. – 2008. – Т. 453. – №. 7197. – С. 899-902.
3. Balatsky A. V., Basov D. N., Zhu J. X. Induction of charge density waves by spin density waves in iron-based superconductors // *Physical Review B*. – 2010. – Т. 82. – №. 14. – С. 144522.
4. Fernandes R. M., Chubukov A. V., Schmalian J. What drives nematic order in iron-based superconductors? // *Nature physics*. – 2014. – Т. 10. – №. 2. – С. 97-104.

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ПРОТОНАМИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ГРАНАТОВ $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$ ($x = 0,1,2,3$)

Федюнин Ф.Д.¹, Спасский Д.А.^{2,3}, Спасский А.В.², Козлова Н.С.⁴, Забелина Е.В.⁴,
Касимова В.М.⁴, Бузанов О.А.⁵

¹ *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия,*

² *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына, Москва, Россия,*

³ *Институт физики Тартуского университета, Тарту, Эстония*

⁴ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*

⁵ *АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия*

E-mail: veter.vett@yandex.ru

Сцинтилляционные кристаллы с общей формулой $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$ (GAGG), легированные ионами Ce^{3+} являются перспективными материалами для использования в медицине и физике высоких энергий [1, 2]. Эти кристаллы сочетают в себе такие качества, как высокая плотность [3], химическая стабильность, высокий сцинтилляционный выход и хорошее энергетическое разрешение [4]. Также одним из важных параметров сцинтиллятора является радиационная стойкость. Ранее было показано, что в GAGG:Ce в УФ области появляются полосы наведенного поглощения после облучения кристаллов высокоэнергетическими частицами [4]. Однако, анализ параметров и природы полос наведенного поглощения затруднен, так как полосы поглощения примесных ионов Ce^{3+} также расположены в УФ области. Кроме того, ранее исследования проводились для достаточно узкого ряда кристаллов с $x = 2$ и 3 , так как они являются наиболее перспективными для применения.

В настоящей работе рассматривается влияние катионного состава беспримесных смешанных кристаллов гранатов на характер полос наведенного поглощения под воздействием протонного облучения.

Кристаллы были облучены протонами с энергией 6.7 МэВ из 120-см циклотрона НИИЯФ МГУ. Флуенс пучка протонов на поверхности кристаллов составлял $1.4 \cdot 10^{14}$ протонов/см².

Показано, что облучение приводит к появлению дополнительных полос поглощения в области прозрачности кристаллов. Обнаружены две полосы наведенного поглощения с максимумами при 3.0 и 3.9 эВ. Интенсивность полос зависит от состава кристалла и уменьшается с увеличением содержания алюминия в смешанном кристалле. Кроме того, обнаружено, что поглощение в энергетической области 4.4 - 5.4 эВ уменьшается после облучения. Предполагается, что наблюдаемые эффекты могут быть связаны как с перезарядкой дефектов, так и с меньшим сечением взаимодействия с протонами в кристаллах граната, где катионы Ga частично замещены легкими катионами Al.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант №20-02-00688) и Министерства образования и науки Российской Федерации (грант № 075-15-2021-1353).

1. Lecoq P. Development of new scintillators for medical applications // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2016. – T. 809. – C. 130-139.
2. Alenkov V. et al. Irradiation studies of a multi-doped $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$ scintillator // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2019. – T. 916. – C. 226-229.
3. Korzhik M. et al. Ce-doped $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$ scintillator for compact, effective and high time resolution detector of the fast neutrons // arXiv preprint arXiv:1807.06390. – 2018.
4. Dilillo G. et al. Space applications of GAGG: Ce scintillators: a study of afterglow emission by proton irradiation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2022. – T. 513. – C. 33-43.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОЛИКРИСТАЛЛЫ ВОЛЬФРАМА

А.Д. Завильгельский¹, А.В. Назаров², Ю.В. Балакшин², А.А. Шемухин², А.Д. Шпорин¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет,
Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: zavilgelsky.ad15@physics.msu.ru

В настоящее время требуется развитие методов создания и диагностики конструкционных материалов для ядерной и термоядерной энергетики, в том числе термоэлектрических и сверхпроводящих материалов. Образование пустот ведет к охрупчиванию, которое является основной причиной разрушения материала в условиях облучения. Следовательно, контролируемое образование дефектов, вызванных облучением, или смягчение его негативных последствий, является ключом к разработке передовых радиационно-стойких материалов с балансом механических и тепловых свойств. Ионное облучение позволяет контролируемо создавать дефекты в материалах, что является определяющим фактором при изучении влияния дефектов на их свойства.

В работе было исследовано влияние параметров ионного облучения на формирование дефектов в покрытии из W с помощью компьютерного моделирования методами бинарных столкновений и молекулярной динамики. Для моделирования дефектообразования в процессе облучения проводилось с использованием программы SRIM [1] и PARCAS [2]. Перевод параметров облучения в величину параметра DPA – смещений на атом, проводился согласно [3].

Компьютерное моделирование дефектообразования под действием ионного облучения ионами He и Ar, основанное на статистическом моделировании каскадов бинарных столкновений, продемонстрировало развитие этапов процесса дефектообразования в вольфрамовом покрытии для различных значений параметра DPA. В процессе моделирования дефектообразования учитывались обратнорассеянные налетающие ионы, а также процесс распыления подложки. Энергии ионов не превышали 0.1 МэВ. Было показано, что нанокристаллические металлы с объемно-центрированной структурой (ВСС) обладают большей радиационной стойкостью, чем их ультратонкозернистые или крупнозернистые аналоги.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-72-10118 «Ионное облучение как метод модифицирования электрических и оптических свойств углеродных наноструктур».

1. J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, Vol. 268, 2010
2. K. Nordlund // Comput. Mater. Sci. Vol. 448, Issue 3, 1995
3. Yu.V. Balakshin, D.K. Minnebaev, E.A. Vorobyeva, A.P. Evseev, A.V. Nazarov, A.A. Shemukhin, V.S. Chernysh // Moscow University Physics Bulletin, Vol. 77, Issue 3, 2022

НИТРОВАНИЕ ФЕНОЛА ВОДОЙ, АКТИВИРОВАННОЙ ИМПУЛЬСНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ ГОРЯЧЕЙ ПЛАЗМЫ

Н.А. Аристова¹, И.П. Иванова², И.М. Пискарев³, В.А. Ушканов³

¹Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Нижнетагильский технологический институт (филиал), Нижний Тагил, Россия

²Институт биологии и биомедицины Нижегородского государственного университета имени Н.И. Лобачевского. Нижний Новгород, Россия

³Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: i.m.piskarev@gmail.com

Нитрование – реакция введения нитрогруппы NO₂ в молекулы органических соединений. Реакция нитрования может протекать по электрофильному, нуклеофильному или радикальному механизму. Для фенола возможно нитрозирование и нитрование. Место присоединения нитрогруппы определяется ориентантом, роль которого играет группа OH. Продуктом нитроирования является 4-нитрозофенол (присоединение группы NO) Продуктом нитрования является 4-нитрофенол (присоединение группы NO₂). Сам 4-нитрофенол может быть получен через стадию нитроирования фенола в присутствии серной кислоты с последующим окислением 4-нитрозофенола различными реагентами, в том числе азотной кислотой или перекисью водорода. Выход 4-нитрофенола достигает 80%. Значительную роль играет очистка продукта от концентрированных реагентов. Т.е. нитрование является сложным технологическим процессом. Поэтому представляет интерес поиск альтернативных путей осуществления реакции нитрования.

В работе [1] на примере тирозина показано, что под действием импульсного излучения горячей плазмы искрового электрического разряда происходит нитрование тирозина с образованием 3-нитротирозина. Т.е. установлено, что нитрование возможно с использованием импульсного излучения горячей плазмы. Под действием излучения в воде образуются реакционно-способные продукты, поэтому вода становится активированной. В результате распада накопившихся продуктов активность воды со временем уменьшается, но она сохраняет активность до 14 суток [2]. Поэтому представляет интерес изучить процесс нитрования под действием воды, активированной импульсным излучением горячей плазмы искрового разряда. Нитрование представляет практический интерес с точки зрения получения ароматических нитросоединений.

Дистиллированная вода активировалась импульсным излучением горячей плазмы. Горячая плазма создавалась генератором искрового разряда ИР10 [3]. Рабочим газом служил воздух при атмосферном давлении. Область газа, в которой происходил разряд, излучала как черное тело, нагретое до температуры ~ 10⁴ °К. Максимум спектра излучения приходился на длину волны 220 нм. Полная длительность импульса тока 100 мкс, передний фронт 50 нс, энергия в импульсе 5.9 x 10⁻² Дж, частота повторения импульсов 10 Гц, мощность, выделяемая в разряде, составляла 0.59 Дж/с. Интенсивность УФ излучения генератора ИР10, определенная иодометрическим методом, составляла (1.26 ± 0.2) 10⁻¹⁰ моль(см² с)⁻¹.

Идентификация 4-нитрофенола осуществлялась по линии поглощения 300 нм, которая в щелочном растворе смещалась до 401 нм. Исследовалась зависимость выхода 4-нитрофенола в реакции фенола с активированной водой от концентрации фенола в исходной пробе 8 ÷ 500 мг/л для времени обработки 10 минут (доза 350 ± 20 Дж). Активированная импульсным излучением горячей плазмы вода смешивалась с пробой раствора фенола в соотношении 1:1. Концентрация 4-нитрофенола растет с концентрацией исходного фенола и выходит на плато, определяемое количеством

генерируемых активных частиц. Исследовалась также зависимость выхода 4-нитрофенола в реакции с активированной водой при концентрации фенола в пробе 25 мг/л от времени обработки до 40 минут, доза до 1450 ± 50 Дж, см. рисунок 1. Видно, что максимальная доля образовавшегося 4-нитрофенола составляет примерно 70% от начальной концентрации фенола.

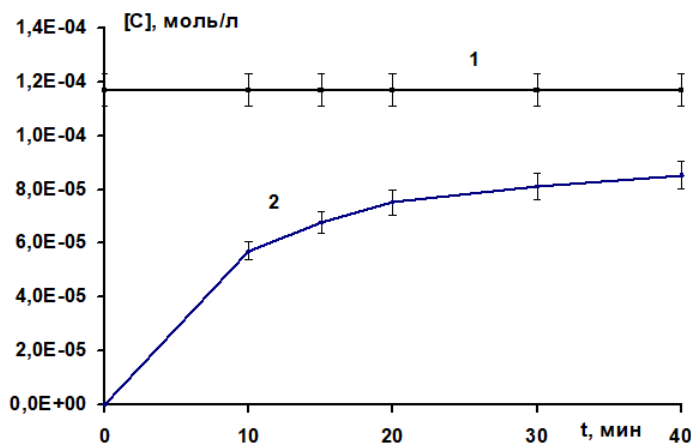


Рис. 1 [C] – концентрация продуктов, моль/л; t, мин – время, в течение которого активировалась излучением проба воды. Цифрами обозначены: (1) – исходная концентрация пробы фенола 25 мг/л в смеси с дистиллированной водой 1:1; (2) – концентрация 4-нитрофенола в смеси исходного фенола 25 мг/л и воды 1:1, активированной излучением в течение времени t через два дня после обработки.

Дополнительно сравнивался выход 4-нитрофенола при прямом воздействии излучения на раствор фенола 25 мг/л и через активированную воду. Результаты приведены в таблице 1. Из таблицы видно, что выход 4-нитрофенола при непосредственном воздействии излучения на раствор и через активированную воду одинаков.

Таблица 1. Концентрация 4-нитрофенола, образовавшегося при непосредственном воздействии излучения на раствор фенола и через активированную воду.

| Условия эксперимента | Концентрация 4-нитрофенола |
|----------------------------------------|--------------------------------|
| Непосредственное воздействие излучения | $(5.9 \pm 0.5) 10^{-5}$ моль/л |
| Через активированную воду | $(6.4 \pm 0.5) 10^{-5}$ моль/л |

Таким образом, показано, что выход 4-нитрофенола при контакте с активированной излучением плазмой водой составляет порядка 70%, а выход продукта в реакции с активированной водой и при непосредственном воздействии излучения на раствор одинаков. Поэтому нитрование активированной водой может быть использовано в практике биомедицинских исследований.

1. И.П. Иванова, И.М. Пискарев. Нитрование тирозина под действием импульсного излучения горячей плазмы // Химия Высоких Энергий. 2022, том 56, №5. 361.
2. И.М. Пискарев. Вода, активированная излучением плазмы искрового разряда на воздухе // Химия Высоких Энергий. 2019, том 53, №1, 71.
3. I.M. Piskarev, I.P. Ivanova. Effect of spark electric discharge between solid electrodes in water // Plasma Sources Sci. Technol. 2019, v. 28, 085008 (10 pp).

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ГЕМОГЛОБИНА В ОБРАЗЦАХ МЯСА ГОВЯДИНЫ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ УСКОРЕННЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Межетова И.Т.¹, Близнюк У.А.^{1,2}, Борщеговская П.Ю.^{1,2}, Козлова Е.К.³, Гудкова О.Е.³

¹ *Физический факультет МГУ,*

кафедра физики ускорителей и радиационной медицины, Москва, Россия

² *Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, Москва, Россия*

³ *Научно-исследовательский институт общей реаниматологии имени В.А.Неговского*

E-mail: mezhetova.it19@physics.msu.ru

В современном мире радиационные технологии широко применяются во многих областях науки и техники, в том числе и в пищевой промышленности. Ионизирующее излучение используется для обработки пищевых продуктов с целью подавления жизнедеятельности болезнетворной и патогенной микрофлоры, населяющей пищевую продукцию, что дает возможность повысить ее микробиологическую безопасность, а также увеличить сроки годности [1].

Ионизирующее излучение вызывает процесс окисления гемоглобина в крови. поэтому если в облучаемом продукте присутствует кровь, то по концентрации продуктов окисления гемоглобина, которыми являются метгемоглобин, оксигемоглобин и дезоксигемоглобин, можно определить, подвергалось ли мясо радиационной обработке.

Целью работы являлось исследование концентраций производных гемоглобина в образцах мяса говядины в течение 4 суток после воздействия ионизирующим излучением в различных дозах.

В качестве объекта исследования была выбрана охлажденная говяжья вырезка, хранившаяся при 5 °С в течение суток после забоя. Были подготовлены куски массой $3,5 \pm 0,5$ г толщиной не более 5 мм и помещены в чашки Петри с диаметром 35 мм и высотой 14 мм.

Образцы мяса облучали в дозах 0.1 кГр, 1 кГр и 10 кГр с помощью ускорителя электронов непрерывного действия УЭЛР-1-25-Т-001 с максимальной энергией 1 МэВ в НИИЯФ МГУ и средней мощностью пучка 25 кВт. Так как пробег электронов с энергией 1 МэВ в мясе говядины составляет не более 4 мм, для получения равномерно распределенной поглощенной дозы по всему объему продукта проводилось двустороннее облучением образцов. Для оценки дозы, поглощенной образцами, проводилось компьютерное моделирование с использованием инструментария GEANT4. Моделирование выполнялось с учётом энергетического спектра ускорителя и заряда, поглощенного дюралюминиевой пластиной, на которой находились обрабатываемые образцы. Заряд определялся с помощью АЦП (ООО “Производственное объединение Овен”, Россия), погрешность в определении заряда составила не более 2 %. Погрешность в определении дозы, поглощенной образцами, составила не более 10 %.

После облучения, для получения спектра поглощения производных гемоглобина, образцы мяса помещали в физиологический раствор объемом 5 мл, спустя час суспензию центрифугировали с помощью центрифуги Universal 320 (Andreas Hettich GmbH & Co. KG, Германия) с частотой оборотов 3500 об/мин в течение 5 минут, затем измеряли оптическую плотность суспензии на спектрофотометре Unico 2800 (United Products & Instruments, USA) в диапазоне длин волн от 130 нм до 1100 нм с шагом 2 нм. Остальные образцы говядины находились в холодильнике при температуре 4 С в течение 4 суток после радиационной обработки. В ходе эксперимента спектры поглощения производных гемоглобина измерялись на 0, 1 и 4 сутки после облучения. Для определения концентраций производных гемоглобина использовали метод подгонки нелинейной кривой.[3] Для этого необходимо сначала экспериментально получить набор оптических плотностей, измеренных на соответствующих длинах волны, после чего была определена

функция, с помощью конструктора функций гибкой подгонки Origin от Origin Pro 2019 (OriginLab Corporation, США).

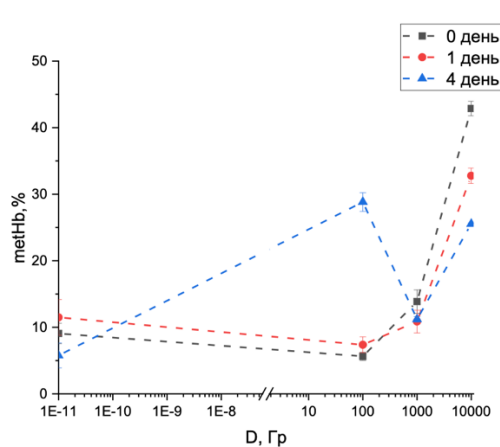
$$D_l(\lambda_l)_{\text{теор}} = \varepsilon_{\text{Hb},l} C_{\text{Hb}} L + \varepsilon_{\text{HbO}_2,l} C_{\text{HbO}_2} L + \varepsilon_{\text{MetHb},l} C_{\text{MetHb}} L + \frac{E}{\lambda^4} + D$$

По результатам исследования были построены графики зависимости концентрации метгемоглобина как индикатора окислительных процессов в образцах говядины, облученной в различных дозах, а также в контрольных необлученных образцах от времени хранения продукта (рис. 1). Из рисунка видно, что концентрация метгемоглобина в образцах мяса измеренная на 0 и 1 сутки после облучения, увеличивалась с увеличением дозы облучения.

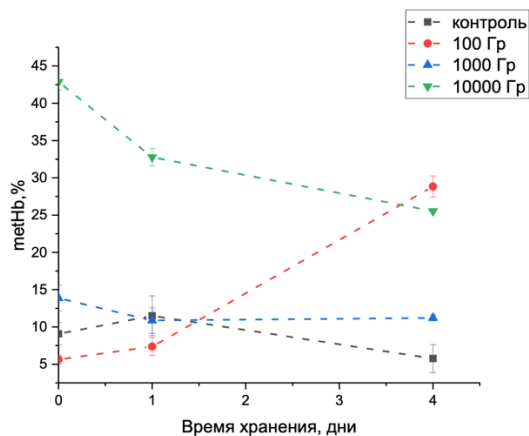
У контрольного образца концентрация метгемоглобина увеличилась на 1 сутки и заметно уменьшилась на 4 сутки, также уменьшение концентрации со временем наблюдается у образца, облученного в дозе 10кГр. Этот процесс может быть связан с переходом метгемоглобина в другие формы. Однако мы наблюдаем в образце, облученном в дозе 10кГр скачок в концентрации metHb в 4 раза, что говорит о высокой интенсивности окислительных процессов в 1 день.

Значительных изменений концентраций метгемоглобина в образцах, облученных в дозе 1 кГр не наблюдалось. При облучении образцов в дозе 0,1 кГр концентрация metHb увеличивается на 4 сутки в 6 раз, по сравнению с 0 днем, что говорит о высокой интенсивности окислительных процессов с течением хранения.

Спустя 4 суток после обработки концентрация метгемоглобина во всех облученных образцах была в среднем выше контрольных значений. Таким образом, концентрация метгемоглобина может являться индикатором воздействия ионизирующего излучения на продукты, содержащие гемоглобин в большой концентрации, такие, как мясо говядины.



Зависимости относительных концентраций метгемоглобина в образцах мяса говядины от дозы облучения, измеренные на 0, 1 и 4 сутки после облучения



Зависимости относительных концентраций метгемоглобина в образцах мяса говядины, облученных в дозах 100, 1000 и 10000 Гр, а также в контрольных образцах, от времени хранения

1. A.P. Chernyaev, S.M. Varzar, P.Yu. Borshegovskaya., A.V. Belousov, U.A. Bliznyuk. Accelerators in Various Sectors of the World Economy // Physics of Particles and Nuclei Letters. – 2016. – Vol. 13. – N.7. – PP. 988-990.
2. Wang, D., et al., 2013. In vivo reduction of cell-free methemoglobin to oxyhemoglobin results in vasoconstriction in canines. Transfusion (Paris) 53 (12), 3149–3163.
3. Kozlova E, Chernysh A, Moroz V., Sergunova V., Zavialova A, Kuzovlev A. Nanoparticles of perfluorocarbon emulsion contribute to the reduction of methemoglobin to oxyhemoglobin. *International Journal of Pharmaceutics* . 2016;497(1–2):88–95. doi: 10.1016/j.ijpharm.2015.11.035.

РАДИОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ БАКТЕРИЙ *ESCHERICHIA COLI* ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ

В. С. Иванцова¹, У. А. Близнюк^{1,2}, П. Ю. Борщеговская^{1,2}, В. С. Ипатова²,
З. К. Никитина³, И. К. Гордонова³, А. П. Черняев^{1,2}, Д. С. Юров²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

³Всероссийский научно-исследовательский институт лекарственных и
ароматических растений, Москва, Россия

E-mail: ivantcova.vs20@physics.msu.ru

Продукты питания являются питательной средой для широкого спектра микроорганизмов, включая условно-патогенные и патогенные бактерии (*Escherichia coli*, *Listeria monocytogenes*, *Salmonella enterica* и др.), плесневые грибы (*Aspergillus*, *Penicillium*, *Cladosporium*), а также различные вирусы и паразиты. Употребление таких продуктов может привести как к пищевому отравлению, так и к острой кишечной токсикоинфекции [1]. В связи с этим одной из главных задач пищевой индустрии является обеспечение безопасности и качества продукции.

Наряду с традиционными методами обработки продуктов питания, такими как химическая и термическая, в последние годы широкое распространение находит метод радиационной обработки. Использование источников ионизирующего излучения, таких, как ускоренные электроны с энергией до 10 МэВ, рентгеновского излучения с энергией до 5 МэВ и гамма-излучения источников ⁶⁰Со и ¹³⁷Cs, позволяет обеспечить высокую микробиологическую и радиационную безопасность продукта [2]. При этом метод применим для продукции в товарной упаковке, что позволяет исключить его повторную загрязнённость.

На сегодняшний день многочисленными исследованиями установлены значения доз, необходимые для подавления микроорганизмов до допустимого уровня, регламентируемые государственными стандартами, или для достижения полной стерильности продукта. Одним из критериев оценки эффективности облучения является величина D_{10} , характеризующая дозу, необходимую для инактивации 90% жизнеспособных клеток, которая рассчитывается по формуле [3]:

$$D_{10} = D / (\log_{10} N - \log_{10} N_0),$$

где N_0 – начальное количество жизнеспособных клеток; N – количество жизнеспособных клеток после облучения дозой D ; D – доза облучения.

Согласно результатам исследований других авторов на значение D_{10} могут оказывать влияние множество факторов: температура, тип продукции или питательной среды, начальная обсеменённость, источник ионизирующего излучения и др. [3-6]. В связи с этим, исследования по влиянию различных физических и технических параметров облучаемого объекта является актуальным.

Целью данного исследования было изучить влияние ускоренных электронов с энергией 1 МэВ на изменение концентрации жизнеспособных клеток бактерий *E.coli* в физиологическом растворе от дозы облучения при различных начальных концентрациях бактерий.

В качестве объекта исследования использовались условно-патогенные бактерии *Escherichia coli* (референтный штамм Американской коллекции типовых культур (АТСС) – *E.coli* АТСС 25922), выращенные на питательном агаре. Бактерии *E.coli* разводили

в физиологическом растворе в соотношении 1:2, в концентрациях 10^3 , 10^4 и 10^5 КОЕ/г, после чего 0.5 мл суспензии бактерий помещали в стерильные 2 мл пробирки типа эппендорф (АО «РЗП», Россия).

Облучение суспензии бактерий проводилось на ускорителе электронов УЭЛР-1-25-Т-001 (НИИЯФ МГУ, Россия) с максимальной энергией 1 МэВ, средней мощностью тока 0.1 мкА при температуре окружающей среды 20 °С. Образцы в количестве 6 штук выкладывались на дюралюминиевую пластину на расстоянии 12 см от выхода пучка электронов. Контроль и расчет дозы, поглощенной образцами, проводился с использованием инструментария Geant4 (ЦЕРН, Швейцария). Дозы облучения составили 150 Гр, 300 Гр, 600 Гр, 1000 Гр и 4000 Гр, мощность дозы – 2 Гр/с.

После облучения бактерии суспензии высевались на поверхность питательной тиогликолевой среды в различных разведениях с физиологическим раствором от 1:2 до 1:10000, далее на третьи сутки после облучения происходил расчет концентрации жизнеспособных клеток в КОЕ/г в облученных и контрольных необлученных образцах.

По результатам исследования были построены кривые радиочувствительности с рассчитанными значениями D_{10} для облученных в различных дозах бактерий и контрольных образцов *E.coli* при различных начальных концентрациях бактерий в суспензии.

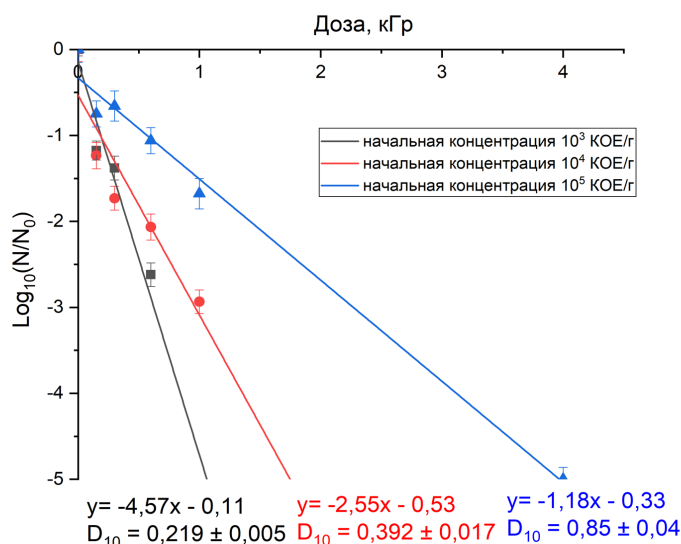


Рис. 1. Кривые радиочувствительности бактерий *E.coli* в физиологическом растворе при различных начальных концентрациях бактерий.

Из рис. 1 видно, что с увеличением начальной концентрации бактерий с 10^3 КОЕ/г до 10^5 КОЕ/г значение D_{10} увеличивается от (0.219 ± 0.005) кГр до (0.85 ± 0.04) кГр.

Таким образом, на основании полученных экспериментальных данных по влиянию различных начальных концентраций бактерий *E.coli* в физиологическом растворе на их радиочувствительность установлено, что начальная концентрация оказывает значительное влияние на дозу, необходимую для подавления популяций бактерий в 10 раз. Причем при увеличении начальной концентрации микроорганизмов в 10 раз, доза, необходимая для уменьшения популяции на 90 %, увеличивается в 2 раза.

На основании проведенного исследования можно сделать вывод о том, что при увеличении начальной обсемененности продукта необходимо воздействовать на него в большей дозе для подавления микробиологической контаминации до определенного уровня.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта №22-63-00075.

1. M.Cap, C. Lires, C. Cingolani. Identification of the Gamma Irradiation Dose Applied to Ground Beef that Reduces Shiga Toxin Producing Escherichia Coli but Has No Impact on Consumer Acceptance // *Meat Sci.* 2021. V. 174. 108414.
2. B. Kalyani, K. Manjula. Food irradiation - technology and application // *International Journal of Current Microbiology and Applied Sciences.* 2014. V. 3(4). P. 549-555.
3. A.G. Abraham, T.T. Wellington, A. Victoria. Microbiological quality of chicken sold in Accra and determination of D 10-value of E. coli // *Food and Nutrition Sciences.* 2012. V. 3. P. 693-698.
4. C.H. Sommers, O.J. Scullen, S. Sheen. Inactivation of uropathogenic Escherichia coli in ground chicken meat using high pressure processing and gamma radiation, and in purge and chicken meat surfaces by ultraviolet light // *Frontiers in Microbiology.* 2016. V. 7.
5. Xu, Aixia, O. Scullen, Sheen. Inactivation of extraintestinal pathogenic E. coli clinical and food isolates suspended in ground chicken meat by gamma radiation // *Food Microbiology.* 2019. V. 84. 103264.
6. O. Chirinos, M. Vizeu, Destro, M. Franco. Inactivation of Escherichia coli O157:H7 in hamburgers by gamma irradiation // *Brazilian Journal of Microbiology.* 2002. V. 33. P. 53-56.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ В ТКАНЕЭКВИВАЛЕНТНЫХ СРЕДАХ

И. Ф. Жаринов¹, А. Н. Сустатова¹, А. А. Щербаков^{1,2}, А. П. Черняев^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: jarinov.vanya@yandex.ru

В медицинской физике широко используются различные ускорители, одними из самых распространенных являются линейные ускорители электронов. Ускоренные электроны, проходя через тормозную мишень, порождают поток вторичных частиц, которые затем воздействуют непосредственно на ткани.

Чтобы лечение было максимально безопасным и эффективным, перед облучением проводится моделирование с расчетом поглощенных различными тканями и органами доз. Это порождает проблему выбора материала, которым заменяют человеческое тело при проведении расчетов, а также экспериментов. Вода уже является достаточно хорошо изученным тканеэквивалентным материалом, поэтому в этой работе были исследованы другие материалы — акрил, полистирол, парафин и пластик А-150, в сравнении с водой.

Моделирование производилось с помощью программного пакета GEANT4 на основе метода Монте-Карло. Был разработан аппроксимирующий метод для оптимизации расчетов, который позволил уменьшить время вычислений на два порядка. В рамках моделирования был симулирован поток вторичных частиц, которые рождались при прохождении такого пучка электронов через вольфрам-медную мишень, чтобы тормозные фотоны имели максимальную энергию 20 МэВ. Были построены количественные (по типу частиц), энергетические и глубинные дозовые распределения для вторичных частиц в пяти тканеэквивалентных материалах и составлены сравнительные таблицы. Для отдельных частиц были получены сравнительные дозовые коэффициенты [1, 2].

Наиболее близкие к воде распределения вторичных частиц среди рассматриваемых материалов имеет полистирол. Для полистирола полная доза имеет отклонение от воды менее 3%. Также сравнительно небольшое отклонение продемонстрировал акрил, а тканеэквивалентный пластик А-150 по некоторым дозовым характеристикам имеет довольно большое отличие [1, 2]. Результаты обсуждаются.

Таблица 1. Отношение полной дозы в материале к дозе в воде.

| Материал | Отношение общей дозы к дозе в воде |
|----------------------------|------------------------------------|
| Полистирол | 0,9662 |
| Парафин | 0.9039 |
| Акрил | 1.1035 |
| Тканеэквивалентный пластик | 1.1169 |

Таблица 2. Вклады в дозу различных типов вторичных частиц, нормированные на вклад этого же типа частиц в воде.

| Материал | Гамма-кванты | Электроны | Позитроны |
|----------------------------|--------------|-----------|-----------|
| Вода | 1.00 | 1 | 1 |
| Полистирол | 0.59 | 0.97 | 0.80 |
| Парафин | 0.45 | 0.91 | 0.66 |
| Акрил | 0.96 | 1.11 | 0.98 |
| Тканеэквивалентный пластик | 2.05 | 1.13 | 0.97 |

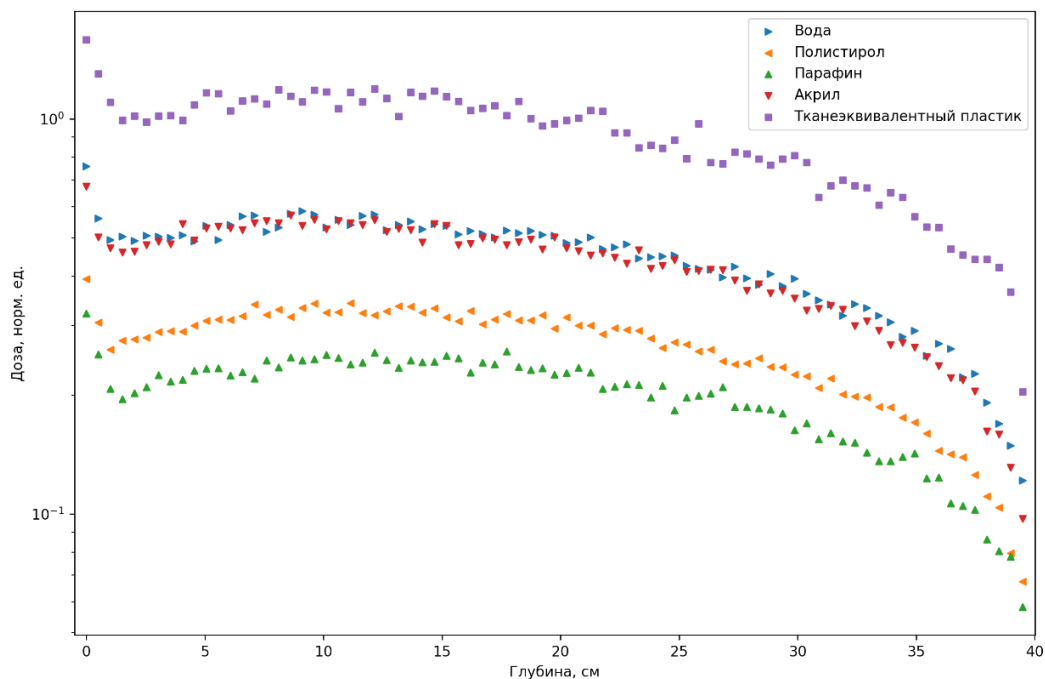


Рисунок 1. Распределение дозы от вторичных гамма-квантов от глубины для различных материалов.

1. Черняев А. П. Ионизирующие излучения. / А. П. Черняев – 4-е изд., испр. И дополн. – М.: Издательский дом «КДУ», 2021;
2. Климанов В. А., Крамер-Агеев Е. А., Смирнов В. В. Дозиметрия ионизирующих излучений: учебное пособие / под ред. В. А. Климанова. М.: НИЯУ МИФИ, 2015.
3. Беспалов В. И. Взаимодействие ионизирующих излучений с веществом. - Томск: издательство Томского политехнического университета, 2008.
4. Geant4 User's Guide For Application Developers (<https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/AllGuides/html/index.html>).
5. Репозиторий с исходным кодом данной работы в VCS Git в сервисе Github. (<https://github.com/Annndruha/Distribution-of-secondary-particles-in-tissue-equivalent-materials>).

ДОЗИМЕТРИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ ПЛАНОВ ЛЕЧЕНИЯ ПРИ АВТОМАТИЧЕСКОМ И РУЧНОМ ПЛАНИРОВАНИИ В СИСТЕМЕ LEKSELL GAMMA PLAN

Е. А. Новикова¹, И. И. Банникова², В. В. Костюченко², Е. Н. Лыкова¹, А. П. Черняев¹

¹ *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия,*

² *АО "Деловой Центр Нейрохирургии" (Центр «Гамма-нож г. Москва»), Москва, Россия*

E:mail: evgeniyanovikovazar@gmail.com

Гамма-нож (Leksell Gamma Knife Icon) — современная установка для стереотаксической радиохирургии внутричерепных патологий. Подведение дозы во время лечения осуществляется с помощью 192 источников ⁶⁰Co, расположенных в восьми независимых секторах. Излучение от каждого источника проходит через круглые отверстия - коллиматоры четырех возможных конфигураций: диаметрами 4 мм, 8 мм, 16 мм и полностью закрытый коллиматор (блок) [1]. Подведение дозы в точку при фиксированном наборе коллиматоров называют "шотом". Планирование лечения на Гамма-ноже представляет собой подбор положения и относительного времени лечения каждого шота. Традиционный ручной метод планирования является сложным и трудоемким процессом, результат которого сильно зависит от опыта планировщика. В связи с этим в последние годы активно развиваются автоматизированные методы планирования лечения.

Данная работа посвящена программному обеспечению обратного планирования Leksell Gamma Knife Lightning, формирующему планы лечения на основе заданного пользователем набора ограничений [2]. Ее целью является представление результатов сравнения основных показателей качества планов облучения небольших (объемом до 1 см³) метастазов, созданных в автоматическом режиме планирования с использованием Leksell Gamma Knife Lightning, с планами, созданными стандартным ручным методом.

Многочисленные исследования [2-6] показали, что использование в клинической практике Lightning имеет ряд преимуществ. Во-первых, не наблюдается значимых различий в качестве обратно оптимизированных планов, созданных начинающими и опытными пользователями. Во-вторых, система автопланирования позволяет уменьшить время облучения или сохранить его на уровне ручных планов. Все авторы отмечали существенное сокращение затраченного на создание планов времени. В-третьих, оптимизированные планы могут демонстрировать статистически значимое улучшение качества (увеличение PCI¹, снижение градиентного индекса GI² и максимальной дозы на критические структуры) почти в 60% случаев в выборке из 75 пациентов [2] и в 76% в группе из 115 одиночных мишеней [3].

В представленной работе была рассмотрена выборка из 4 пациентов со множественными мелкими метастазами (суммарно 33 очага). Для каждого случая было создано два плана: с использованием оптимизатора Lightning и в стандартном ручном режиме.

Небольшие метастазы, имеющие форму близкую к сферической, при ручном планировании обычно облучают одним шотом, с диаметром большим, чем диаметр

¹ $PCI = \frac{TV_{PIV}^2}{TV \cdot PIV}$, где TV_{PIV} — объем мишени, охватываемый предписанной дозой, TV — объем мишени, PIV — суммарный объем тканей, облученный дозой.

² $GI = \frac{PIV_{50\%}}{PIV}$, где $PIV_{50\%}$ — суммарный объем тканей, облученный дозой, равной половине предписанной.

мишени. Далее подбирается значение изодозы, при которой диаметр изодозовой кривой близок к диаметру метастаза. Значение параметра покрытия в обеих группах планов было приведено к 1.

Результат оценки статистических различий между ручными и оптимизированными планами лечения представлен на рис. 1. В данной выборке значимых различий между параметрами (время лечения, селективность, GI, минимальная доза в очаге) не было выявлено. Для достоверного определения разницы между параметрами планов необходимо увеличение количества рассматриваемых мишеней.

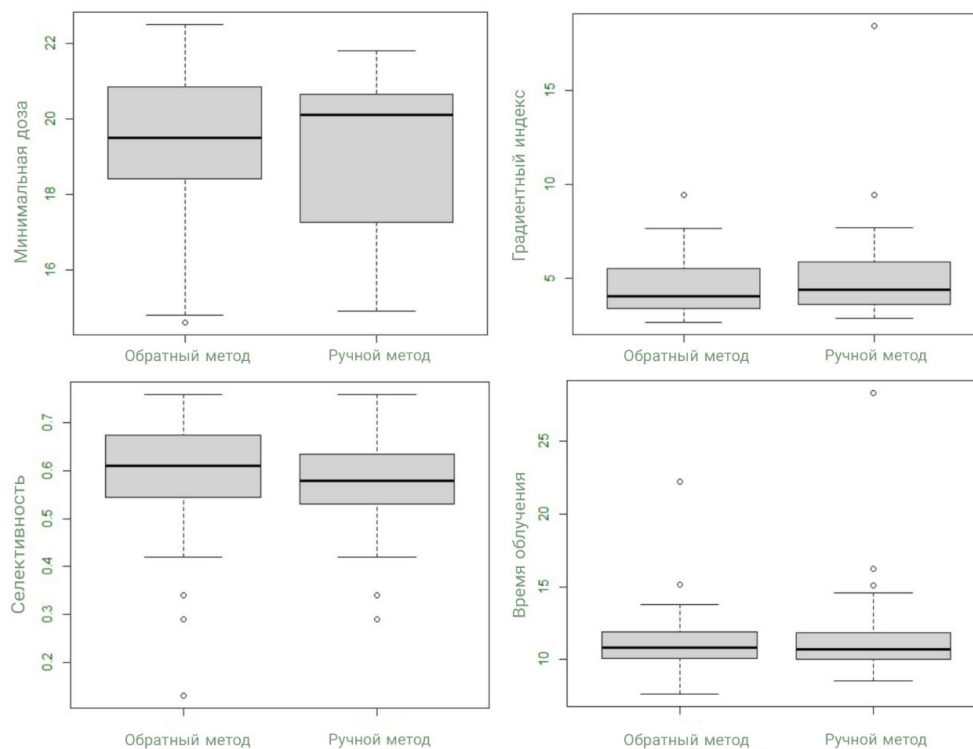


Рис. 1. Диаграммы размаха значений дозиметрических параметров, полученных с помощью ручного и обратного методов планирования

В последующих исследованиях планируется увеличить размер выборки и рассмотреть в качестве значимых параметров объемы $V_{10Гр}$, $V_{12Гр}$ здоровой ткани, получающей дозу в 10 и 12 Гр соответственно. Полученные данные могут быть использованы в дальнейшем для оценки эффективности использования Lightning при планировании пациентов с множественными метастазами.

[1] А. В. Голанов и В. В. Костюченко. Нейрорадиохирургия на Гамма-ноже - М. : ИП Т. А. Алексеева, 2018 – 960 с.

[2] J. Sjölund, S. Riad, M. Hennix, H. Nordström, A Linear Programming Approach To Inverse Planning In Gamma Knife, Medical Physics, <https://doi.org/10.1002/mp.13440> (2019).

[3] D.J. Wiczorek, R. Kotecha and M.D. Hall et al. Systematic Evaluation And Plan Quality Assessment Of The Leksell Gamma Knife Lightning Dose Optimizer, Medical Dosimetry, doi: 10.1016/j.meddos.2021.08.006 (2021).

[4] Taoran Cui et al. Clinical Evaluation Of The Inverse Planning System Utilized In Gamma Knife Lightning, Frontiers in Oncology, doi: 10.3389/fonc.2022.832656 (2022).

[5] Manon Spaniol et al. Inverse Planning In Gamma Knife Radiosurgery: A Comparative Planning Study, Physica Medica, doi: 10.1016/j.ejmp.2021.02.019 (2021)

[6] Damodar Pokhrel et al. Clinical Validation Of Novel Lightning Dose Optimizer For Gamma Knife Radiosurgery Of Irregular-Shaped Arteriovenous Malformations And Pituitary Adenomas, Medical Physics, doi: 10.1002/ACM2.13669 (2022)

ВОЗДЕЙСТВИЕ УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 1 МЭВ НА БЕЛОК БЫЧИЙ СЫВОРОТОЧНЫЙ АЛЬБУМИН

Близнюк У.А.^{1,2}, Борщеговская П.Ю.^{1,2}, Браун А.В.³, Ипатова В.С.^{1,2}, Никитченко А.Д.¹,
Родин И.А.^{3,4}, Хмелевский О.Ю.¹, Черняев А.П.^{1,2}, Юров Д.С.²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

²Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

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

⁴Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова,
Москва, Россия

E-mail: thexmeli99@gmail.com

Безопасность пищевой продукции для потребителя и увеличение её сроков хранения на сегодняшний день являются одной из главных задач пищевой промышленности. Не прекращается поиск новых экономически выгодных методов обработки продуктов, которые будут лучше сохранять питательные качества продуктов и удовлетворять всем нормам безопасности продукта.

Радиационная обработка относится к одним из эффективных методов обработки продуктов питания. Она позволяет подавить рост патогенных микроорганизмов и увеличить срок хранения продукта без дополнительных химических добавок, заморозки или термического воздействия.

Различная степень воздействия ионизирующего излучения может приводить к различным физико-химическим изменениям в структуре продукта. Продукты радиолитического разложения, образующиеся в результате ионизации и возбуждения молекул воды, начинают влиять на биохимические процессы и создавать различные структурные повреждения основных органических макромолекул в веществе. Одними из важных составляющих структуры продуктов животного и растительного происхождения являются белковые молекулы.

Под воздействием ионизирующего излучения в структуре белков могут происходить изменения: разрывы водородных, дисульфидных связей, распад на полипептиды, образование сшивок, нарушение вторичной и третичной структуры белка и другие.

Основной целью данной работы являлось исследование влияния радиационного воздействия на структуру белковых молекул. В качестве опытного образца был выбран белок бычий сывороточный альбумин (БСА). Данный белок составляет около 60 % от всех белков плазмы крови и часто используется в качестве модельного в исследованиях, а полученные результаты изменений могут быть использованы для исследования других основных белковых молекул в плазме крови и тканях.

Образцы БСА в физиологическом растворе помещались в микроцентрифужные пробирки, выкладывались на дюралюминиевую пластину и облучались на ускорителе электронов непрерывного действия УЭЛР-1-25-Т-001 с энергией 1 МэВ. Для оценки поглощенной дозы в объеме образца использовался ферросульфатный метод дозиметрии. По изменению оптической плотности в растворе FeSO₄, облучаемом при тех же условиях, что и опытные образцы, была рассчитана поглощенная доза. По графику дозы от времени была определена средняя мощность дозы. Она составила 18,5 Гр/с. С помощью полученной мощности и значений времени накопления заряда при каждом облучении

образцов были рассчитаны дозы, поглощенные образцами БСА. Они составили 0,3 кГр, 0,6 кГр, 1 кГр, 4 кГр, 8 кГр и 20 кГр.

Для количественной оценки молекул белков, сохранивших первичную структуру после облучения в разных дозах, с помощью метода ферментативного гидролиза БСА с использованием трипсина и с выделением уникальных пептидов оценивалась структурная целостность белковой молекулы. Подсчет уникальных пептидов, содержащихся в доменах белковых молекул, оценивался с помощью жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения с тандемным масс-спектрометрическим детектированием высокого разрешения (ВЖЭХ-МС/МС), которая позволила оценить количество белка в нативной форме в исследуемых образцах.

В результате были выбраны следующие варианты для идентификации БСА в образцах с помощью трех уникальных пептидов (FKDLGEEHFК (T35-44), AEFVEVTK (T249-256) и KQTALVELLK (T548-557)). Обнаруженный белок делился на три группы: надежно обнаружен (есть три уникальных пептида), условно обнаружен (есть один уникальный пептид T249-256) и не обнаружен (концентрация БСА в пробе менее 0,5 мкг/мл).

По результатам исследования влияния ускоренных электронов на содержание уникальных пептидов в образцах раствора БСА была построена диаграмма относительных концентраций идентифицированных уникальных пептидов T35-44, T249-256, T548-557 от поглощенной дозы. Был сделан вывод, что с увеличением дозы уменьшается концентрация уникальных пептидов в растворе. Данные изменения, вероятно, были связаны с процессами денатурации белка в результате разрыва пептидных связей молекулы.

В результате данной работы предложен метод оценки содержания нативной формы БСА с использованием трипсинолиза в водных образцах БСА. С помощью данного метода было изучено влияние ускоренных электронов с энергией 1 МэВ на структуру белковых молекул в растворе БСА, облученном в дозах 0,3 кГр - 20 кГр. Были получены следующие результаты: в дозах 0,3 кГр, 0,6 кГр и 1 кГр количество белка в активной форме уменьшалось в 3 раза по сравнению с контрольными значениями, в дозах 4 кГр и 8 кГр количество белка снижалось в 5-10 раз, и в дозе 20 кГр белок в активной форме не обнаруживался.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕРЕОТАКСИЧЕСКОГО ОБЛУЧЕНИЯ МОЗГА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАДИОИЗОТОПА ^{60}Co

Н. Д. Кречетов¹, С. А. Золотов¹, Ф. Р. Студеникин^{1,2}, А. П. Черняев^{1,2}, С. А. Соколов¹,
У. А. Близнюк^{1,2}, П. Ю. Боршеговская^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет

²Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына Московского
Государственного факультета имени М. В. Ломоносова
Россия, 119234, Москва, Ленинские горы д. 1, стр. 2

E-mail: krechetov.nd20@physics.msu.ru

Исследование влияния ионизирующего излучения на живые ткани человека последние десятилетия является важной задачей современной науки. Это играет особую роль в радиационной медицине, которая использует ионизирующее излучения для лечения патологий, возникающих во внутренних органах человека, которые являются трудно достижимыми стандартными хирургическими методами.

Экспериментальное изучение и оценка ущерба здоровым тканям мозга при его облучении является трудной задачей, что связано с различной локализацией очагов поражения в тканях и невозможностью напрямую оценить изменения, происходящие в них под действием излучения. Поэтому в исследованиях прибегают к методам компьютерного моделирования, часть из которых базируется на методе Монте-Карло и реализована в инструментариях, развиваемых научным сообществом (MCNP, MCNPX, GEANT4...) [The Irradiation Panel, Review of Monte Carlo Modelling Codes, London. (2007)].

В данной работе было рассмотрено стереотаксическое облучение сферического водного фантома радиусом 12 см с уплотнением в центре радиусом 1 см — модели мозга с опухолевым образованием. Для этого был расширен стандартный пример, входящий в состав инструментария Geant4 — *gammaknife*, — в котором рассматривается схема с односторонним облучением мозга. В геометрию были введены дополнительные ячейки с источниками излучения (^{60}Co , 1.17 МэВ), чтобы сформировать схему стереотаксического облучения с фиксированным изоцентром.

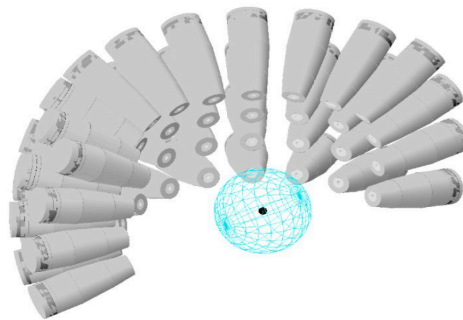


Рис. 1 Облучение сферического водного фантома излучением от источников с ^{60}Co .

Для получения дозового распределения водный фантом был разбит на $N = 100$ шаровых слоёв, одинаковой толщиной 0.12 см и переменным радиусом в диапазоне от 0 до 12 см с шагом 0.12 см (рис. 2). Доза, поглощенная фантомом, рассчитывалась по формуле:

$$D = \sum_{i=0}^N \frac{\Delta E_i}{\Delta m_i} = \sum_{i=0}^N \frac{\Delta E_i}{\rho \left(\frac{4}{3}\pi(R_i + \Delta R_i)^3 - \frac{4}{3}\pi R_i^3 \right)},$$

где ΔE_i - энергия, поглощенная в объеме i -го слоя, Δm_i - масса i -го слоя.

На рисунке 3 представлена зависимость дозы от радиуса шарового слоя в облучаемом гамма-ножом водном фантоме:

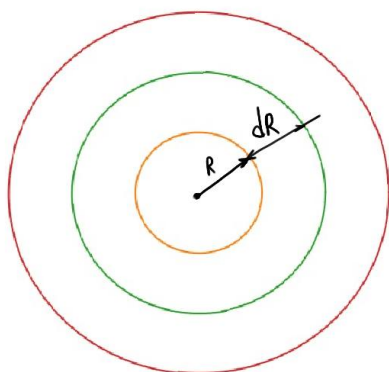


Рис. 2 Разбиение фантома на сферические слои.

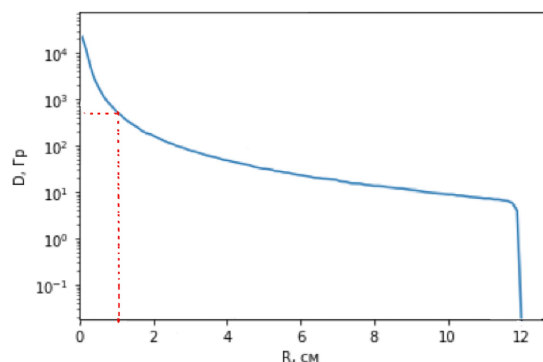


Рис. 3 Радиальное распределение дозы по объёму фантома.

На графике видно, что доза в радиусе одного сантиметра от центра, где располагалась облучаемая опухоль в 10–100 раз больше, чем в остальном объёме мозга. Однако в остальных областях доза, несмотря на свою малость, не равна нулю, что является негативным эффектом процедуры на гамма-ноже.

В дальнейшем, полученные при моделировании распределения поглощённой дозы, могут быть сопоставлены с биологическими эффектами и учтены при планировании лучевой терапии.

Исследование выполнено при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

1. С. А. Золотов. Оценка однородности распределения поглощённой дозы в объектах сложной геометрии при их радиационной обработке / С. А. Золотов – маг. дис., 2021. 48 с
2. University of Virginia, School of medicine. [электронный ресурс] // <https://med.virginia.edu/Neurosurgery.History.and.technical.overview> URL: <https://med.virginia.edu/neurosurgery/services/gamma-knife/for-physicians/history-and-technical-overview/> (дата обращения 01.05.2022)
3. Ф. Р. Студеникин, У. А. Близнюк, А. П. Черняев, В. В. Ханкин, Г.А. Крусанов. Физика атомного ядра и элементарных частиц. Влияние алюминиевых пластин-модификаторов пучка на однородность распределения поглощенной дозы по глубине объекта при обработке ускоренными электронами. ВМУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2022 №1. С. 3–9.

ДОЗИМЕТРИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ БИООБЪЕКТОВ НА УСКОРИТЕЛЕ УЭЛР-1-25-Т-001

С. А. Соколов¹, С. А. Золотов¹, Ф. Р. Студеникин^{1,2}, Н. Д. Кречетов¹, А. П. Черняев^{1,2},
У. А. Близнюк^{1,2}, П. Ю. Борщеговская^{1,2}, Д. С. Юров²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: sokolov.sa20@physics.msu.ru

Увеличение сроков хранения пищевых продуктов при сохранении их качества является актуальной задачей. Одной из наиболее эффективных и безопасных технологий выступает обработка ионизирующим излучением [1]. Однако, для успешного применения радиационной обработки необходимо контролировать величину дозы и характер её распределения по объему обрабатываемого продукта.

Для контроля поглощенной дозы в промышленности применяют пленочные дозиметры [2]. Однако, они позволяют измерить поглощенную дозу в пленке на поверхности объекта. Таким образом, оценить распределение поглощенной дозы по объему облучаемого объекта возможно только с применением дополнительных методов расчета, например, компьютерного моделирования.

В исследованиях в области взаимодействия ионизирующего излучения с веществом основным инструментом для моделирования являются транспортные коды, базирующиеся на методе Монте-Карло (MCNPX, PENELOPE, GEANT4) [3]. В данной работе расчеты выполнены с использованием инструментария GEANT4 (CERN, Швейцария) [4], позволяющего учесть физико-технические характеристики источника излучения, схему эксперимента и физико-химические характеристики самого объекта [5].

Было рассмотрено экспериментальное исследование радиационной обработки гомогената мяса форели ускоренными электронами с помощью ускорителя электронов непрерывного действия УЭЛР-1-25-Т-001 с энергией 1 МэВ и средней мощностью пучка 25 кВт. Образцы в чашках Петри размещались на дюралюминиевой пластине на расстоянии 12 см от выхода пучка электронов. При каждом облучении фиксировали заряд, упавший на пластину, и время облучения. По этим данным рассчитывалась интегральная поглощенная доза.

Целью работы являлся расчёт распределения поглощённой дозы по глубине облучаемых объектов и установление зависимости дозы от величины заряда, упавшего на пластинку при радиационной обработке на ускорителе УЭЛР-1-25-Т-001.

Моделирование выполнялось с использованием инструментария GEANT4, с подключением пакетов физики QBBC и Livermore [6]. Распределение поглощенной дозы рассчитывалось в фантоме в виде водного параллелепипеда 20 мм x 20 мм x 10 мм, помещённого в чашку Петри из полистирола диаметром 35 мм, высотой 14 мм и толщиной крышки 0.8 мм. Чашка Петри располагалась на дюралюминиевой пластине 60 мм x 300 мм, находящейся на расстоянии 12 см от плоскости источника.

На *рис. 1 (а)* представлен график зависимости дозы, поглощенной водным параллелепипедом, от глубины проникновения электронов облучению фантома в закрытой и открытой чашке Петри, рассчитанный путём компьютерного моделирования.

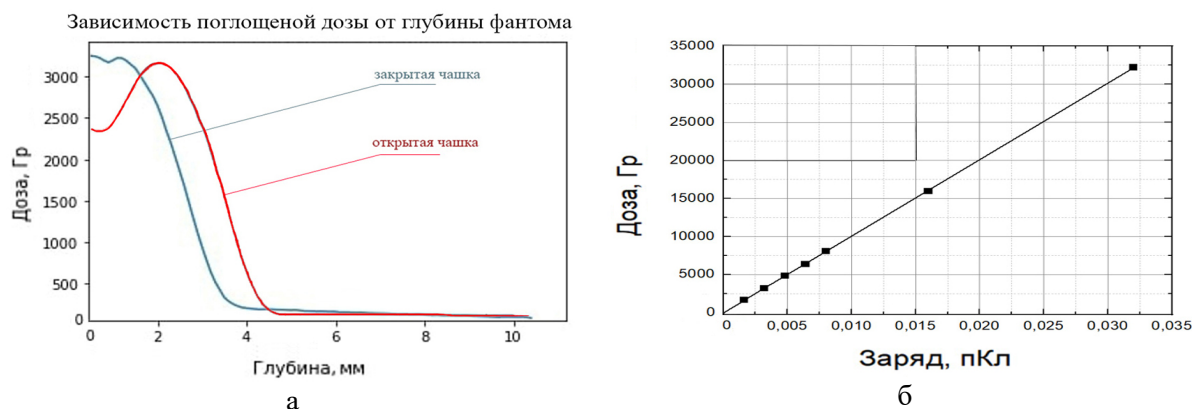


Рис. 1 – а) Зависимость дозы, поглощенной водным фантомом, от глубины прохождения электронов; б) Зависимость дозы, поглощенной фантомом от заряда, упавшего на пластину.

Из рис. 1 (а) видно, что при облучении фантома при закрытой чашке (синий график), распределение дозы имеет локальный максимум на расстоянии 1.3 мм от поверхности фантома, вид полученной зависимости отличается от классического распределения поглощенной дозы от электронов по глубине облучаемого объекта, это связано с наличием крышки, изменяющей распределение поглощенной дозы по сравнению с облучением без крышки (красный график). При прохождении пучка электронов через 0.8 мм полистирола происходит размывание энергетического спектра пучка в сторону меньших энергий, что с одной стороны приводит к увеличению поглощенной дозы в поверхностных слоях (до 2 мм) облучаемого объекта, а с другой к более быстрому спаду дозы в глубинных слоях (2-5 мм).

На рис. 1(б) представлен график зависимости поглощенной фантомом дозы от заряда, упавшего на пластинку. Из графика видно, что полученная зависимость является линейной. Рассчитать дозу, зная заряд, упавший на пластинку можно по формуле:

$$D = B * q,$$

где D – доза в Гр, q – заряд в пКл, B – коэффициент пропорциональности. $B \approx 10^6$ Гр/пКл. Используя данную зависимость в сочетании с компьютерным моделированием можно осуществлять дозиметрическое планирование радиационной обработки биообъектов.

Исследование выполнено при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

1. Черняев А.П. Радиационные технологии. Наука. Народное хозяйство. Медицина // Москва: Издательство Московского университета, 2019. — 231 с.
2. Государственный первичный специальный эталон единицы мощности поглощенной дозы интенсивного фотонного, электронного и бета- излучений для радиационных технологий ГЭТ 209-2014 / В. В. Алейкин, В. В. Генералова, А. А. Громов [и др.] // Менделеево, ВНИИФТРИ, Альманах современной метрологии 2015, № 5. С. 54–74.
3. The Irradiation Panel, Review of Monte Carlo Modelling Codes, London. (2007),
4. Geant4 Scope of Application [Электронный ресурс] // <https://geant4.web.cern.ch/>: CERNgeant4 overview. URL: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/IntroductionToGeant4/html/IntroductionToG4.html>
5. Применение низкоэнергетических электронов для радиационной обработки охлажденной форели / А. П. Черняев, У. А. Близинок, П. Ю. Борщеговская и др. // Письма в журнал Физика элементарных частиц и атомного ядра. — 2020. — Т. 17, № 4. — С. 681–687.с
6. A.V. Ivantchenko et al. Geometry and physics of the Geant4 hadronic physics for space radiation environment. International Journal of Radiation Biology, 88(1-2):171-175, sep 2011.
7. Близинок У.А., Студеникин Ф.Р. и др. Характеристики дозовых распределений электронных пучков, используемых при радиационной обработке пищевой продукции // Известия Российской академии наук. Серия физическая 2021 том 85 №10.

ФОТОНЕЙТРОННЫЕ РЕАКЦИИ В ПРИРОДНОЙ СМЕСИ СЕЛЕНА

Ф.А. Расулова¹, Р.А. Алиев^{2,3}, С.С. Бельшев^{4,5}, А.А. Кузнецов^{4,5}, В.В. Ханкин⁴,
Н.Ю. Фурсова⁴

¹Институт ядерной физики, АН РУз, Ташкент, Узбекистан

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

³Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁴Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

⁵Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

E-mail: rasulova.inp@mail.ru

В данной работе для исследования были выбраны фотоядерные реакции, протекающие на стабильных ядрах селеновой мишени. Природный селен состоит из шести стабильных изотопов со следующими массовыми числами и содержанием изотопов: ^{74}Se (0,89%), ^{76}Se (9,37%), ^{77}Se (7,63%), ^{78}Se (23,77%), ^{80}Se (49,61%) и ^{82}Se (8,73%). Хотя все эти изотопы могут подвергаться фоторасщеплению по разным реакционным каналам, до настоящего времени изучены только фотонейтронные реакции, а именно $^{nat}\text{Se}(\gamma, xn)$ [1-7], $^{76}\text{Se}(\gamma, n)^{75}\text{Se}$ [8], $^{76}\text{Se}(\gamma, 2n)^{74}\text{Se}$ [9], $^{76}\text{Se}(\gamma, n)^{75}\text{Se} + ^{76}\text{Se}(\gamma, p)^{75}\text{As}$ [9], $^{77}\text{Se}(\gamma, n)^{76}\text{Se}$ [10], $^{78}\text{Se}(\gamma, n)^{77}\text{Se}$ [6,8], $^{78}\text{Se}(\gamma, 2n)^{76}\text{Se}$ [9], $^{80}\text{Se}(\gamma, n)^{79}\text{Se}$ [6,11], $^{80}\text{Se}(\gamma, 2n)^{78}\text{Se}$ [9] и $^{82}\text{Se}(\gamma, 2n)^{81m,g}\text{Se}$ [6,9,12].

В данном исследовании измерялись выходы радионуклидов $^{73(m+g)}\text{Se}$, ^{75}Se , ^{79m}Se , $^{81(m+g)}\text{Se}$, ^{71}As , ^{72}As , ^{74}As , ^{76}As , ^{77}As , ^{78}As и ^{79}As , образующихся в $^{nat}\text{Se}(\gamma, xnup)$ многочастичные реакции с конечной энергией тормозного излучения 55 МэВ. Тормозное излучение генерировали с помощью ускорителя электронов РМ-55 в Институте ядерной физики им. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, а выходы реакций определяли по индуцированной активности, измеренной с помощью γ -спектрометрии. На рис. 1 приведен типичный спектр γ -квантов облученного образца природного селена через 21 ч после облучения.

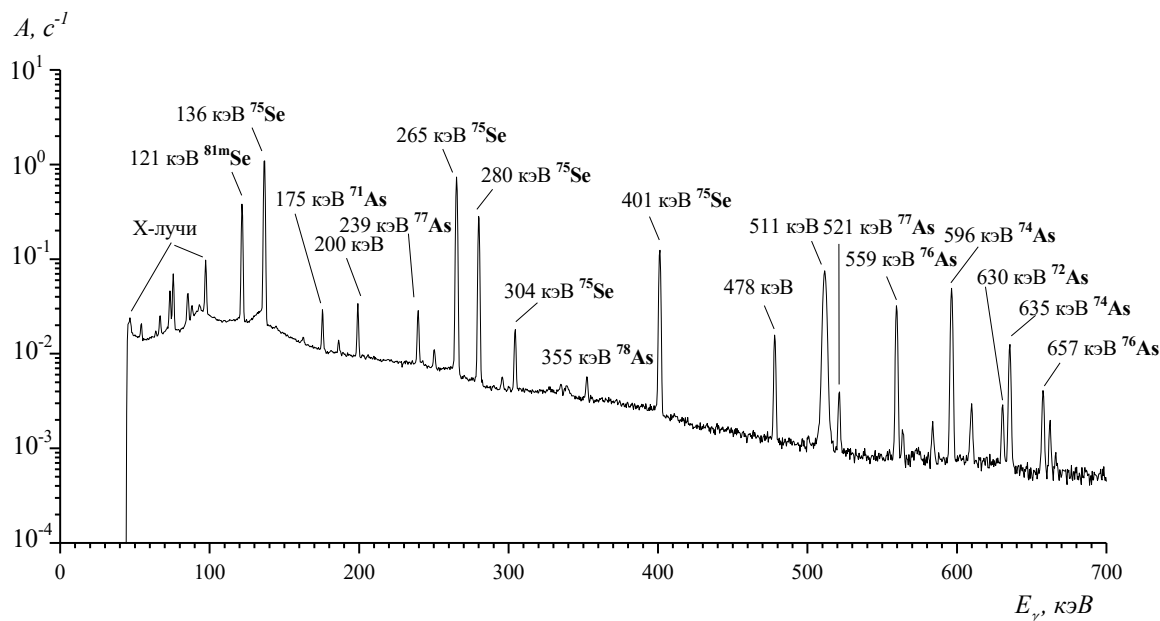


Рис. 1. Спектр остаточной активности облученной мишени селена через 21 час после окончания облучения. Продолжительность измерения спектра составляла 1 час

Измерение выхода радионуклидов, образующихся в фотопротонных реакциях на природном селене, является первым в своем роде. Экспериментально полученные выходы фотоядерных реакций сравниваются с выходами, рассчитанными с использованием теоретических сечений фотоядерных реакций из КМФР [13] и программы TALYS-1.6 [14]. Наблюдается хорошее согласие экспериментальных данных с результатами расчетов методом КМФР как для фотонейтронных, так и для фотопротонных реакций.

1. A.M.Goryachev, G.N.Zalesnyy. The studying of the photoneutron reactions cross sections in the region of the giant dipole resonance in zinc, germanium, selenium, and strontium isotopes // Вопросы теоретической и ядерной физики, 1982, (8), 121, 1982.
2. T. D. Thiep, T. T. An, N. T. Khai, P. V. Cuong, N. T. Vinh, A. G. Belov, and O. D. Maslov. Study of the isomeric ratios in photonuclear reactions of natural selenium induced by bremsstrahlungs with endpoint energies in the giant gipole resonance region //Radioanal. Nucl. Chem. 292(3), 1035 (2012).
3. A.D.Antonov, N.P.Balabanov et al. // Isomeric ratios in the reaction (γ,n) for nuclei in the range $A = 70 - 125$. C, MINSK, 286, 1991.
4. M.G.Davydov, F.Sh.Khamraev et al. Isomeric Ratios of Photonuclear Reaction Yields of Some Nuclei at $E\gamma(\max) = 22$ MeV // Proc. 38th Ann. Conf. Nucl. Spectrosc. Struct. At. Nuclei, Baku, p. 320 (1988)..
5. M. G. Davidov, B. G. Magera, and A. B. Treuhov, "Isomeric yield ratios (cross-sections) of photonuclear reactions," Atomic Energy 62(4), 236 (1987).
6. V.M.Mazur, I.V.Sokolyuk, Z.M.Bigam. Cross section (γ,n)-m reaction for $^{78,80,82}\text{Se}$ nuclei in the E1 giant-resonance region // J, SNP, 54, 541, 1991.
7. Fam Zui Hien, Ngo Kuang Zui, Nguen Tak An. J, YF, 35, 257, 1982.
8. F.Kitatani, H.Harada et al. Measurement of ^{76}Se and ^{78}Se (γ, n) Cross Sections // Journal of Nuclear Science and Technology, 48, 1017, 2011.
9. P.Carlos,H.Beil,R.Bergere et al. A study of the photoneutron contribution to the giant dipole resonance of nuclei in the $64 \leq A \leq 86$ mass region // Nuclear Physics A, 258, 365, 1976.
10. F.Kitatani, H.Harada, S.Goko et al. Measurement of the $^{77}\text{Se}(\gamma,n)$ cross section and uncertainty evaluation of the $^{79}\text{Se}(n,\gamma)$ cross section // Journal of Nuclear Science and Technology, 53, 475, 2016.
11. S.A.Yates,B.Fallin,C.R.Howell et al. // Measurement of the $^{80}\text{Se}(\gamma,n)$ reaction with linearly polarized gamma rays. Journal of Physics Review C, 98, 054621, 2018.
12. S. R. Palvanov and O. Razhabov, "Isomeric yield ratios in photonuclear reactions at at 25 and 30 MeV," Atomic Energy 87(1), 533 (1999).
13. Ишханов Б. С., Орлин В. Н. Модифицированная версия комбинированной модели фотоядерных реакций// Ядерная физика. 78, с. 601. 2015.
14. TALYS-1.96: A. J. Koning, S. Hilaire, S. Goriely, TALYS user manual, A nuclear reaction program, NRG-1755 ZG PETTEN (The Netherlands, 2021).

ОЦЕНКА ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ «ОТПЕЧАТКОВ ПАЛЬЦЕВ» ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ КАРТОФЕЛЯ, ПРОШЕДШЕГО ОБРАБОТКУ РЕНТГЕНОВСКИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Я. В. Зубрицкая¹, У. А. Близнюк¹, М. К. Белемишев², П. Ю. Борщеговская¹,
В. М. Авдюхина¹, Т. А. Болотник², И. А. Родин², А. П. Черняев¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия,

E-mail: yuryana@gmail.com

На данный момент с повышением уровня интереса к радиационным технологиям в России участились случаи установления факта незадекларированной радиационной обработки пищевой продукции, поставляемой как из-за рубежа, так и отечественными производителями. В связи с этим возникает необходимость в разработке универсального экспрессного метода идентификации факта облучения, применимого к широкому спектру продуктов питания. Возникающие в продукте при облучении химические и структурные изменения могут быть использованы для данной цели [1].

Одним из наиболее точных методов количественного и качественного анализа химического состава пищевой продукции является метод газовой хромато-масс-спектрометрии (ГХ-МС), основанный на разделении и идентификации компонентов сложных смесей в газовой среде [2]. Ещё одной группой методов идентификации различий в составе веществ являются методы «отпечатков пальцев» основанные на флуоресценции и спектрометрии. Данный метод используется для выявления самого факта наличия различий в близких по составу веществах [3].

В работе проведён анализ изменений, происходящих в картофеле при его радиационной обработке методом ГХ-МС и методами «отпечатков пальцев» с целью исследования перспективности применения флуорометрического метода «отпечатков пальцев» для идентификации образцов облучённых в различных дозах и необлучённых образцов картофеля.

Источником излучения послужила установка ДРОН УМ-2 с источником питания ПУР5/50 и рентгеновской трубкой БСВ-23 с медным анодом. Пробирки с образцами помещались непосредственно перед бериллиевым окном рентгеновской трубки, ток трубки составил 26 мА, напряжение между катодом и анодом составило 30 кВ. Образцы мякоти картофеля в форме параллелепипедов размерами 15 мм x 5 мм x 5 мм проходили обработку рентгеновским облучением в дозах 100, 250, 500 и 1000 Гр в случае использования метода ГХМС и 100 и 1000 Гр – в случае методов «отпечатков пальцев». Интегральную дозу, поглощенную образцами, определяли с использованием ферросульфатного дозиметра Фрикке. Мощность дозы, поглощаемой образцами, составила $(1,2 \pm 0,2)$ Гр/с. В целях повышения равномерности распределения обработка образцов рентгеновским облучением проводилась с двух сторон по половине необходимого для выбранной дозы времени облучения. Контроль однородности облучения посредством инструментария GEANT 4 показал, что большая часть излучения была поглощена в первых 0,5 мм продукта.

В результате анализа методом ГХ-МС в картофеле был выявлен ряд летучих органических соединений, представленный в таблице 1. Отмечен экспоненциальный рост концентраций таких летучих органических веществ, как ацетон и 2-метилпропаналь с увеличением дозы излучения. Кроме того, облучение в дозах свыше 100 Гр привело к образованию в картофеле нового ранее не обнаруженного в контрольных необработанных образцах вещества метантиола, а в дозах свыше 250 Гр – ацетальдегида.

Таблица 1. Значения площадей пиков хроматограмм, определяющие количественное содержание веществ в картофеле, полученные при анализе образцов методом ГХМС

| Доза, Гр | Ацетон | 2-метилпропаналь | 2-метилбутаналь | 3-метилбутаналь | метантиол | ацетальдегид |
|----------|-----------------------------|-----------------------------|--------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 0 | $(95,4 \pm 2,6) \cdot 10^3$ | $(43,0 \pm 2,3) \cdot 10^3$ | $(46 \pm 12) \cdot 10^3$ | $(33,6 \pm 0,2) \cdot 10^3$ | 0 | 0 |
| 100 | $(174 \pm 11) \cdot 10^3$ | $(57 \pm 9) \cdot 10^3$ | $(36 \pm 22) \cdot 10^3$ | $(31 \pm 17) \cdot 10^3$ | $(34 \pm 18) \cdot 10^3$ | 0 |
| 250 | $(248 \pm 12) \cdot 10^3$ | $(63 \pm 10) \cdot 10^3$ | $(37 \pm 10) \cdot 10^3$ | $(37,1 \pm 1,0) \cdot 10^3$ | $(32,1 \pm 0,3) \cdot 10^3$ | $(18,6 \pm 1,3) \cdot 10^3$ |
| 500 | $(254 \pm 34) \cdot 10^3$ | $(72 \pm 17) \cdot 10^3$ | $(38 \pm 5) \cdot 10^3$ | $(35,4 \pm 1,2) \cdot 10^3$ | $(26,8 \pm 1,3) \cdot 10^3$ | $(18,1 \pm 1,3) \cdot 10^3$ |
| 1000 | $(280 \pm 80) \cdot 10^3$ | $(76 \pm 18) \cdot 10^3$ | $(38 \pm 11) \cdot 10^3$ | $(37,1 \pm 1,2) \cdot 10^3$ | $(31 \pm 18) \cdot 10^3$ | $(16 \pm 7) \cdot 10^3$ |

Для анализа методами «отпечатков пальцев» в водные растворы образцов картофеля добавляли специально синтезированные карбоцианиновые красители [4-7]. Данные красители вступают с образцами в реакции окислительно-восстановительного и агрегатного типов. Изучается изменение интенсивности поглощения полученных смесей в видимом и интенсивности флуоресценции – в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазонах. Для этого проводится съёмка палеток со смесями в указанных диапазонах, после чего с использованием программного обеспечения ImageJ получают информацию о значениях интенсивности смесей на кадрах. Кадры в ИК спектре снимаются с помощью самодельного БИК-визуализатора, включающего в себя красные светодиоды (660 нм) в качестве источника света и фотокамеру Nikon D80 с отсекающим видимый свет до 700 нм светофильтром. Математическая обработка данных производится с использованием надстройки XLSTAT Excel.

Визуализация результатов и последующая математическая обработка с помощью линейного дискриминантного анализа показали возможность полного различения между собой групп необлучённых образцов картофеля и тех, что были облучены в дозах 100 и 1000 Гр. В рамках метода точность различения составила 100%. Причиной данных результатов могло быть как появление обнаруженных методом ГХ-МС новых органических соединений, а также изменений концентраций других летучих органических соединений с увеличением дозы облучения, так и реакция красителей с карбонильными группами, которые не удалось выявить с помощью хроматографического анализа. Таким образом можно сделать вывод, что флуорометрические методы «отпечатков пальцев» возможно использовать для выявления факта радиационной обработки картофеля, однако необходимо наличие необлучённых клубней картофеля для проведения сравнительного анализа.

1. Петриченко Л. К., Васильева А. Г. Влияние ионизирующих излучений на продукты питания: [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/vliyanie-ioniziruyuschih-izlucheniya-na-produkty-pitaniya> (дата обращения 30. 10. 2022).
2. В. Д. Гладилович, Е. П. Подольская. Возможности применения метода ГХ-МС (обзор): журнал «Научное приборостроение», 2010, том 20, № 4, с. 36–49.
3. Рукосуева Е.А. Классификация объектов анализа по данным флуориметрии с использованием добавок флуорофоров («флуоресцентный глаз»): дисс. ... канд. хим. наук. – М.: МГУ имени М.В. Ломоносова, 2021.
4. Zakharenkova, S.A., Katkova, E.A. et al. Aggregation-based fluorescence amplification strategy: "turn-on" sensing of aminoglycosides using near-IR carbocyanine dyes and pre-micellar surfactants. Spectr. Acta A, 2021, 247, 119109.
5. Doroshenko, I.A., Aminulla, K.G. et al. Synthesis of modified conformationally fixed tricarbocyanine dyes for conjugation with therapeutic agents. Mendeleev Commun, 2021, 31, 615–617.
6. Shik, A.V. et al. Carbocyanine-Based Fluorescent and Colorimetric Sensor Array for the Discrimination of Medicinal Compounds. Chemosensors, 2022, 10, 88.
7. Narayanan, N. & Patonay, G.A. New Method for the Synthesis of Heptamethine Cyanine Dyes: Synthesis of New Near-Infrared Fluorescent Labels. J. Org. Chem, 1995, 60, 8, 2391–2395.

ДИФФУЗИОННО-ВЗВЕШЕННЫЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ: МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОБРАБОТКА ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ И РАДИОТЕРАПИИ ВНУТРИЧЕРЕПНЫХ МИШЕНЕЙ

К.А. Помозова^{1,2}, А.П. Черняев², Г.Е. Горлачев³, А.В. Голанов¹

¹ ФГАУ "НМИЦ нейрохирургии им. акад. Н.Н. Бурденко" Министерства здравоохранения РФ, Москва, Россия,

² ФГБОУ ВПО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», Москва, Россия,

³ ГБУЗ Московский Клинический Научный Центр имени А.С. Логанова ДЗМ, Москва, Россия

E-mail: kurazova@nsi.ru

По сравнению с общей радиационной онкологией радиотерапия (РТ) различных заболеваний центральной нервной системы (ЦНС) имеет множество характерных особенностей. Несмотря на стабильность положения мишени по отношению к костным структурам и часто их относительно небольшие размеры, они всегда находятся в непосредственной близости к радиочувствительным структурам и функционально значимым зонам, повреждение которых может привести к возникновению серьезных неврологических симптомов и необратимых реакций [1], что делает конформное и селективное воздействие абсолютно необходимым. Именно поэтому корректная визуализация и точное определение границ патологического очага и окружающих его критических структур является одним из важнейших этапов планирования облучения, обеспечивающий высокий контроль роста опухоли при минимизации токсичности, связанной с лучевым лечением. Нередкими бывают ситуации, когда стандартного набора изображений (компьютерная томография (КТ), магнитно-резонансная томография (МРТ): T1w, T1w+C, T2w, FLAIR) недостаточно для того, чтобы дифференцировать различные морфологические структуры опухолевых и неопухолевых процессов [2] или в принципе их визуализировать, поскольку для подобного класса изображений является невозможным учитывать влияние ориентации компонент ткани и соответственно описывать их архитектуру.

В этом контексте диффузионно-взвешенные изображения [3] (ДВИ, англ. Diffusion-Weighted Imaging (DWI)) стали широко используемой методикой *in vivo* исследования структуры и функций компонент ЦНС, основывающейся на информации о трёхмерной анизотропии диффузии молекул воды в биологических тканях. Чувствительным к диффузии МРТ делают градиентные импульсы, симметрично расположенные относительно рефокусирующего 180° радиочастотного (РЧ) импульса [4]. Анизотропия диффузии указывает на наличие внутри ткани каких-либо упорядоченных в пространстве микроструктур, ограничивающих движение воды, и тем самым задающих направление диффузии.

К причинам затруднения внедрения ДВИ в планирование РТ патологии головного мозга можно отнести: отсутствие чётких подходов к сбору и анализу диффузионных данных в радиотерапевтических целях; технические проблемы, такие как ложная потеря сигнала, чувствительность методики к ряду факторов, приводящих к искажениям изображений, что означает, что: - количественные карты не могут быть использованы, например, для мультимодального анализа, так как не могут быть корректно совмещены с другими изображениями; - изменения в интенсивности изображения могут привести к тому, что некоторые воксели, принадлежащие белому веществу будут интерпретированы, например, как серое вещество, что вызывает ошибки в разграничении областей мозга, следовательно, может привести к ошибочным результатам морфологических измерений. Как следствие этого актуальной является задача разработки

алгоритмов, способствующих имплементации диффузионных данных МРТ (дМРТ) в планирование радиотерапии и радиохирургии патологии головного мозга.

Для разработки приложения «MRDiffusion» был выбран стандартный язык C++, удовлетворяющий современным стандартам и позволяющий использовать ресурсы вычислительных машин максимально.

В рамках данной работы предложен алгоритм математической коррекции вариации интенсивности эхо-сигнала в следствие пространственной неоднородности РЧ поля на основе Байесовской статистики, а также реализована сегментация объема головного мозга на белое вещество, серое вещество и спинномозговую жидкость. Создан алгоритм коррекции дисторсии ДВИ, базирующейся на их деформируемой регистрации с анатомическими сериями МРТ. Максимальное смещение вокселей в рамках разработанного алгоритма не превысило $1,03 \pm 0,12$ мм. Создан инструмент шумоподавления на базе алгоритма анизотропной диффузии. Инструменты «MRDiffusion» реализуют функционал, позволяющий кластеризовать и сегментировать наборы серий МРТ через выделение областей с изменённой функциональностью на основе физических показателей диффузии для индивидуализации клинического объёма облучения. Создан инструмент оценки клинического ответа патологии головного мозга на РТ на основе динамических карт измеряемого коэффициента диффузии. Трактография волокон белого вещества головного мозга выполнена с помощью двух алгоритмов: выделения трактов непрерывным отслеживанием (детерминированная) и трактографии с применением преобразования Хафа (вероятностная). Использование данных трактографии при планировании функциональной радиохирургии по поводу болезни Паркинсона позволяет достигнуть снижение объёма облучения внутренней капсулы, получающей 12 Гр, с 0,402 см³ до 0,254 см³.

Предложенные алгоритмы обработки дМРТ позволяют повысить эффективность и точность диагностики и ЛТ патологии головного мозга. Данные сегментации способствуют уменьшению объёма клинического облучения, сводя к минимуму дозу на нормальные ткани. Трактография волокон белого вещества методом преобразования Хафа предоставляет возможность эффективно оптимизировать дозу облучения органов риска.

1. M. Khasraw, A.B. Lassman. Neuro-oncology: Late neurocognitive decline after radiotherapy for low-grade glioma // *Nat. Rev. Neurol.* 2009, No. 5, 646.
2. S.J. Price, R. Jena, N.G. Burnet, et al. Improved delineation of glioma margins and regions of infiltration with the use of diffusion tensor imaging: an image-guided biopsy study // *AJNR Am. J. Neuroradiol.* 2006. V. 27, No. 9, 1969.
3. Hasan K.M., Walimuni I.S., Abid H., Hahn K.R. A review of diffusion tensor magnetic resonance imaging computational methods and software tools // *Comput Biol Med.* 2011. V. 41, No. 12, 1062.
4. Tanner J. E. Restricted Self-Diffusion of Protons in Colloidal Systems by the Pulsed-Gradient, Spin-Echo Method // *The Journal of Chemical Physics.* 1968. V. 49, No. 4, 1768.

А-ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО И ТРИАНГУЛЯРНОГО ПОТОКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В РЕЛЯТИВИСТСКИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ТЯЖЕЛЫХ ЯДЕР В МОДЕЛИ HYDJET++ И ЭКСПЕРИМЕНТЕ CMS (LHC)

Д. А. Мягков¹, С. В. Петрушанко²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: danila.myagkov.msu@mail.ru

Главная цель экспериментов с использованием релятивистских соударений тяжелых ядер – это изучение адронной материи в экстремальном режиме сверхвысоких температур и плотностей, приводящих к возникновению нового состояния вещества, так называемой “кварк-глюонной плазмы” (КГП). Один из методов исследования процессов, связанных с возникновением и эволюцией КГП, – изучение азимутальной анизотропии рождающихся частиц, главными наблюдаемыми для которой является эллиптический и триангулярный потоки.

Компактный мюонный соленоид (CMS) [1] на Большом адронном коллайдере (LHC) в ЦЕРНе (CERN), благодаря своему точному трекерному детектору и мюонным камерам, широкому охвату калориметров и сильному магнитному полю – отличный эксперимент для тщательного изучения столкновений тяжелых ионов ультрарелятивистских энергий, в том числе и азимутальной анизотропии рождающихся частиц. Проводя исследования начиная с 2010 года, коллаборация CMS опубликовала уже более ста научных статей [2] по физике тяжелых ионов.

Для столкновений Xe–Xe при энергии в системе центра масс на пару нуклонов $\sqrt{s_{NN}} = 5.44$ ТэВ в эксперименте CMS были измерены значения эллиптического v_2 и триангулярного v_3 потоков [3], а также проведено их сравнение аналогичными величинами в соударениях Pb–Pb близкой энергии для ряда центральностей (от 0–5% до 60–70%) [4]. Значения v_2 и v_3 для столкновений Xe–Xe оказались несколько большими, чем в Pb–Pb для наиболее центральных столкновений (но близкими или меньшими для полу-центральных и периферических). Имеется ряд теоретических предсказаний, что это связано с большей флуктуационной составляющей начальной стадии формирования КГП в системе соударений ядер достаточно легкого ксенона по сравнению с более тяжелыми ядрами свинца, после гидродинамического расширения и эволюции которой и возникает подобный эффект [5, 6].

В рамках Монте-Карло модели HYDJET++ [7] (в которой учитывается как гидродинамическое рождение низко-энергичных частиц, так и формирование высоко-энергичных объектов, испытывающих энергетические потери при прохождении через КГП) авторами работы было проведено моделирование рождения частиц в соударениях Xe–Xe и Pb–Pb при энергиях LHC. Проведено сравнение результатов для потоков v_2 и v_3 различных систем сталкивающихся ядер с экспериментальными данными, полученными на установке CMS, а также сделаны выводы о соответствии результатов исследования предсказаниям теоретических моделей.

1. S. Chatrchyan S. et al. (CMS Collaboration). The CMS experiment at the CERN LHC // J. Instrum. 2008. No. 3, S08004.
2. CMS Collaboration. CMS heavy-ion physics publications <http://cms-results.web.cern.ch/cms-results/public-results/publications/HIN/>
3. S. M. Sirunyan A.M. et al. (CMS Collaboration). Charged-particle angular correlations in XeXe collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.44$ TeV // Phys. Rev. C 2019. V. 100, 044902.
4. S. Chatrchyan S. et al. (CMS Collaboration). Measurement of higher-order harmonic azimuthal anisotropy in PbPb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV // Phys. Rev. C 2013. V. 89, 044906.
5. G. Giacalone, J. Noronha-Hostler, M. Luzum, J.-Y. Ollitrault. Hydrodynamic predictions for 5.44 TeV Xe+Xe collisions // Phys. Rev. C 2018. V. 97, 034904.
6. G. Eyyubova, V. Korotkikh, A. Snigirev, E. Zabrodin. Eccentricities, fluctuations and A-dependence of elliptic and triangular flows in heavy-ion collisions // J. of Phys. G 2021. V. 48, No. 9, 095101.
7. I. P. Lokhtin, L. V. Malinina, S. V. Petrushanko, A. M. Snigirev, I. Arsene, K. Tywoniuk. Heavy ion event generator HYDJET++ (HYDroynamics plus JETs) // Comput. Phys. Commun. 2009. V. 180, 779.

ИЗУЧЕНИЕ РОЖДЕНИЯ ТРЁХ W БОЗОНОВ В PP СОУДАРЕНИЯХ ПРИ ЭНЕРГИИ 13 ТЭВ НА БАЗЕ ДАННЫХ ATLAS OPEN DATA

Б. А. Фадеенко¹, Л. Н. Смирнова¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

E-mail: fadeenko.ba19@physics.msu.ru

Измерение рождения трёх векторных бозонов (например WWW, WWZ) позволяет измерить силу взаимодействия таких бозонов в рамках Стандартной Модели (СМ). Любые отклонения от предсказаний СМ могут дать информацию о новой физике более высокого энергетического масштаба [1-2]. Конечные состояния с тремя и более бозонами на данный момент являются недостаточно изученными в связи с их малым сечением рождения. Для процесса рождения WWW конечного состояния определена верхняя граница сечения 730 фб в pp соударениях при энергии 13 ТэВ и интегральной светимости 139 фб⁻¹ [3].

Набор данных Atlas Open Data представляет из себя набор событий, зарегистрированных на детекторе ATLAS на Большом Адронном Коллайдере в 2016 году, который соответствует энергии в системе центра масс соударения протонов $\sqrt{s_{pp}} = 13$ ТэВ и интегральной светимости 10 фб⁻¹, а также события, полученные моделированием Монте Карло, и описывающие различные процессы СМ [4]. Набор данных разделен на несколько групп, соответствующих различному количеству лептонов, гамма квантов и адронных струй в конечном состоянии. В данной работе использовался набор данных с тремя лептонами для анализа распада $W^\pm W^\pm W^\mp \rightarrow l^\pm \nu l^\pm \nu l^\mp \nu$.

Проведён отбор данных в соответствии с требованиями, связанными со строением детектора [5], построены распределения различных характеристик конечного состояния, а также моделированных событий для различных процессов СМ, не относящихся к рождению трёх векторных бозонов (например распад дибозонных состояний WZ).

1. Observation of WWW Production in pp Collisions at $\sqrt{s}=13$ TeV with the ATLAS Detector // Phys. Rev. Lett. 129 (2022) 061803
2. Evidence for the production of three massive vector bosons with the ATLAS detector // Phys. Lett. B 798 (2019) 134913
3. Standard Model Summary Plots February 2022 // ATL-PHYS-PUB-2022-009
4. Review of the 13 TeV ATLAS Open Data release // PUB-OTRC-2020-01
5. Search for triboson $W^\pm W^\pm W^\mp$ production in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV with the ATLAS detector // Eur. Phys. J. C 77 (2017) 141

ПОВЕДЕНИЕ МОМЕНТА ИНЕРЦИИ В СИЛЬНО ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДРАХ ^{24}Mg и ^{20}Ne

В. О. Нестеренко^{1,2}, М. А. Мардыбан^{1,2}, П.-Г. Рейнхард³, А. Репко⁴

¹Лаборатория теоретической физики, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская область, 141980, Россия

² Государственный университет «Дубна», Дубна, Московская область, 141982, Россия

³ Институт теоретической физики II, Университет Эрлангена, D-91058, Эрланген, Германия

⁴ Институт физики Словацкой Академии Наук, 84511 Братислава, Словакия

E-mail: mmardyban@mail.ru

Мы предлагаем самосогласованное описание для момента инерции (МИ) основного состояния в сильно вытянутых легких ядрах ^{24}Mg и ^{20}Ne (с равновесными квадрупольными деформациями $\beta_2=0.605$ и 0.72 соответственно [1]). Эти ядра дают интересную возможность исследовать зависимость МИ от спаривания, корреляций в основном состоянии и формы ядра при экстремальных деформациях. Расчёты выполнены в рамках трех сил Скимра: SVbas, SkM* и Slyб в диапазоне $0.1 < \beta_2 < 1.6$. Применяются три подхода [2]: Инглис-Беляев (в рамках метода Хартри-Фока-Боголюбова), Таулеса-Валатина (в рамках приближения случайных фаз [3]) и адиабатическое приближение зависимое от времени (в рамках метода Хартри-Фока). Для подходов Инглиса-Беляева и адиабатического приближения используется программный код SKYAX [4]. Все три подхода показывают, что вблизи равновесной деформации спаривание в ядрах ^{24}Mg и ^{20}Ne исчезает и мы имеем максимум МИ. С дальнейшим ростом деформации выше равновесных значений, наблюдается спад МИ. Такое поведение МИ объясняется перестройкой одночастичных уровней с ростом деформации. Анализ позволяет выявить основные двухквaziчастичные вклады, ответственные за поведение ИМ в различных режимах.

1. Database <http://www.nndc.bl.gov>

2. P.Ring and P.Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, Berlin, 1980)

3. A. Repko, J. Kvasil and V.O. Nesterenko, Phys. Rev. C **99**, 044307 (2019).

4. P.-G. Reinhard, B. Schuetrumpf, and J. A. Maruhn, Comput. Phys. Commun. **258**, 107603 (2021).

ЭВОЛЮЦИЯ КОЛЛЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА В ЦЕПОЧКЕ ИЗОТОПОВ Zr

Е. В. Мардыбан^{1,2}, Е. А. Колганова^{1,2}, Т. М. Шнейдман¹, Р. В. Джолос^{1,2}

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

E-mail: mardyban@theor.jinr.ru

Свойства коллективных низколежащих состояний изотопов Zr указывают на то, что одни из этих состояний в основном сферические, а другие в основном деформированные. В наших предыдущих работах [1,2] было показано, что структура низколежащих коллективных состояний ⁹⁶Zr может быть удовлетворительно описана в рамках геометрической коллективной модели, основанной на гамильтониане Бора с потенциалом, подтверждающим существование различных формы ядра. На основании

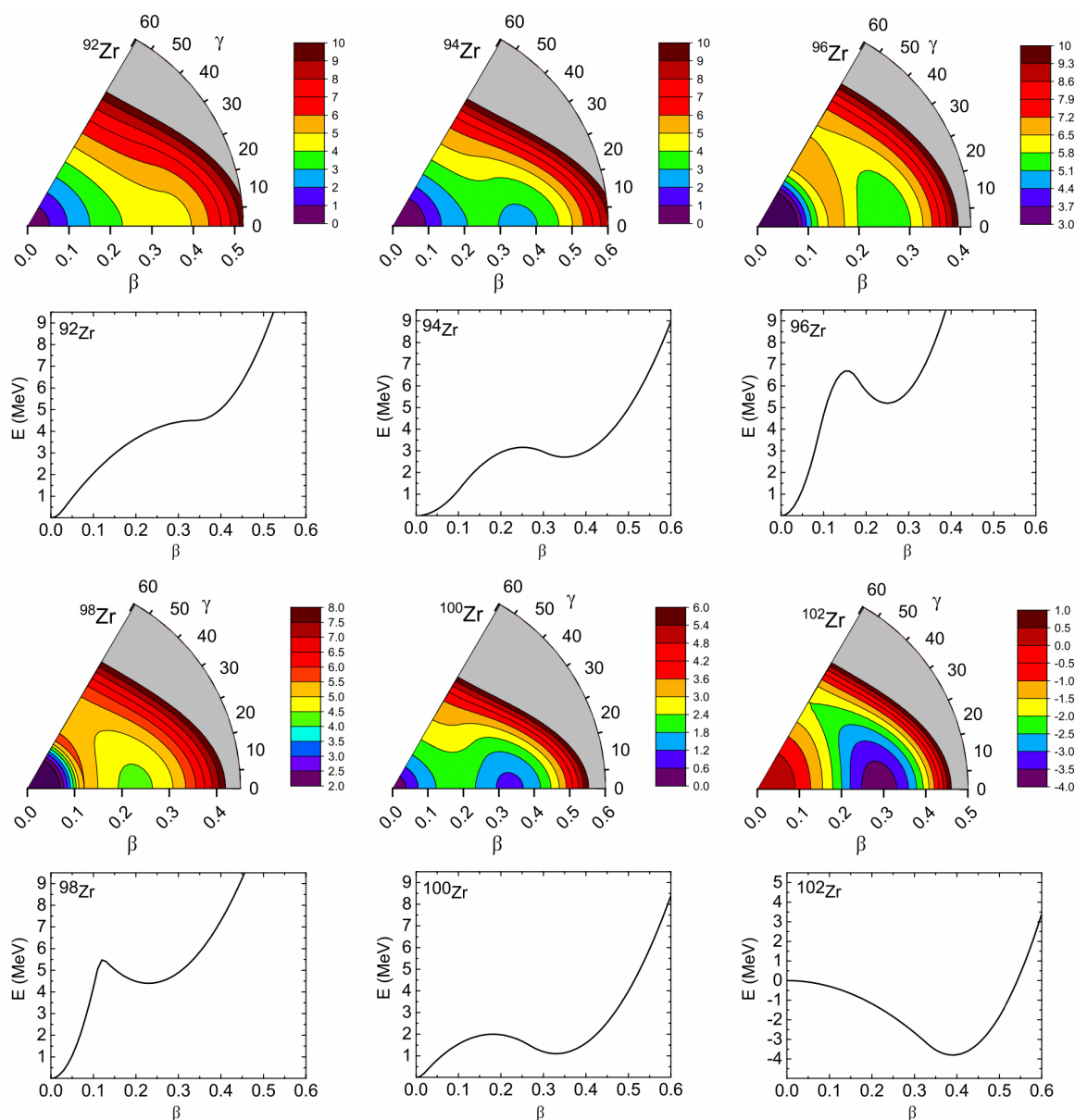


Рис. 1. Коллективный потенциал для четно-четных изотопов Zr, полученный путем подгонки экспериментальных данных для низколежащих коллективных квадрупольных состояний

этих результатов возникает вопрос о возможности исследования свойств низколежащих коллективных состояний $^{92-102}\text{Zr}$ на основе пятимерной геометрической квадрупольной коллективной модели.

Применяется квадрупольно-коллективный гамильтониан Бора, зависящий как от переменных формы β , так и от γ , с потенциалом, имеющим сферический и деформированный минимумы. Относительная глубина двух минимумов, высота и ширина барьера, жесткость потенциала вблизи обоих минимумов определяются таким образом, чтобы добиться наилучшего описания наблюдаемых свойств низколежащих коллективных состояний $^{92-102}\text{Zr}$.

Получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными по энергиям возбуждения и приведенным вероятностям E2-переходов. Описана эволюция коллективного потенциала с ростом A (Рис. 1) и найдены распределения волновых функций коллективных состояний в плоскости β - γ .

Показано, что низкоэнергетическая структура $^{92-102}\text{Zr}$ может быть удовлетворительно описана в рамках геометрической коллективной модели с гамильтонианом Бора. Зависимость потенциальной энергии от β фиксируется для наилучшего описания экспериментальных данных. Результирующий потенциал эволюционирует с увеличением A от наличия только одного сферического минимума в ^{92}Zr через потенциалы, имеющие как сферический, так и деформированный минимумы, к потенциалу с одним деформированным минимумом в ^{102}Zr [3].

1. E. V. Mardyban, E. A. Kolganova, T. M. Shneidman, R. V. Jolos, and N. Pietralla, Phys. Rev. C 102, 034308 (2020).
2. D. A. Sazonov, E. A. Kolganova, T. M. Shneidman, R. V. Jolos, N. Pietralla, and W. Witt, Phys. Rev. C 99, 031304(R) (2019).
3. E. V. Mardyban, E. A. Kolganova, T. M. Shneidman, R. V. Jolos, Phys. Rev. C 105, 024321 (2020).

СТАТУС ВРЕМЯПРОЛЕТНОЙ СИСТЕМЫ TOF ЭКСПЕРИМЕНТА MPD НА КОЛЛАЙДЕРЕ NICA

В. Барышников^{1,2,a)}, В. Бабкин¹, С. Бузин¹, А. Бурдыко¹, М. Буряков¹, В. Головатюк¹,
А. Дмитриев¹, П. Дулов^{1,3}, М. Румянцев^{1,4}, С. Ромахов^{1,4}, Т. Смолянин¹, В. Дроник⁵,
Е. Киданова⁵, А. Пятигор⁵

¹Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6, Дубна, Россия

²Физический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1-2, Москва, Россия

³Физико-технический факультет, Пловдивский Университет «Паисий Хилендарский», Пловдив, Болгария

⁴Государственный университет Дубна, ул. Университетская, 19, Дубна, Россия

⁵Лаборатория перспективных радиационных исследований НИУ "БелГУ", ул. Победы, 85, Белгород, Россия

^{a)}E-mail: baryshnikov@jinr.ru

NICA (Nuclotron based Ion Collider fAcility) – это новый ускорительный комплекс, который создаётся на базе Объединённого института ядерных исследований с целью изучения свойств плотной барионной материи. В коллайдере NICA предусмотрены две точки взаимодействия: одна для изучения столкновения тяжёлых ионов на Многоцелевом детекторе MPD, другая для поляризованных пучков для эксперимента на установке SPD.

Амбициозные физические цели MPD требуют отличной идентификации частиц при максимально возможном диапазоне фазового пространства. Идентификация заряженных адронов достигается с помощью комбинирования измерений времени пролета и информации о потерях энергии (dE/dx) от время-проекционной камеры TPC. TOF обеспечит:

- большой диапазон псевдобыстрот $|\eta| < 2$;
- высокую степень детализации для поддержания общей загрузки системы ниже 15% и минимизации снижения эффективности из-за двойных попаданий;
- хорошее разрешение положения для обеспечения эффективного сопоставления попаданий в TOF систему с треками TPC;
- высокую геометрическую эффективность и эффективность обнаружения;
- идентификацию пионов и каонов с $p_t < 1,5$ ГэВ/с;
- идентификацию (анти)протонов с $p_t < 3$ ГэВ/с;
- функционирование элементов детектора TOF в магнитном поле 0,5 Тл.

Времяпролетная система основана на многозачерных резистивных плоскопараллельных камерах (MRPC), которые успешно применяются для идентификации частиц в подобных экспериментах по всему миру. Для массового производства модулей TOF MPD был организован производственный участок в Лаборатории Физики Высоких Энергий ОИЯИ, включающий весь цикл работ от подготовки материалов для сборки детекторов до тестирования на космическом излучении собранных модулей.

В докладе представлены структура TOF системы, её основные параметры, текущее состояние. Также приведены результаты по декодированию и обработке данных, полученных на установке тестирования модулей.

1. Report on preliminary results of the implementation of the Agreement between the Government of the Russian Federation and the international intergovernmental research organization Joint Institute for Nuclear Research on the construction and operation of a complex of superconducting rings on colliding beams of heavy ions NICA (NICA complex).

https://nica.jinr.ru/documents/Rep_NICA_2019_eng_OK.pdf.

2. MPD Collaboration. Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA // Eur.Phys.J. A, №58, pages 140-189.
3. The MultiPurpose Detector – MPD (Conceptual Design Report), v1.4.
http://nica.jinr.ru/files/CDR_MPD/MPD_CDR_en.pdf.
4. TOF/MPD Collaboration JINR. Technical Design Report of the Time of Flight System (TOF).
http://mpd.jinr.ru/wp-content/uploads/2021/04/TDR_TOF_MPD_v3_02-14_04_2021.pdf.
5. V.A. Babkin, S.N. Bazylev, I.S. Burdenyuk, M.G. Buryakov, A.V. Dmitriev, P.O. Dulov, V.M. Golovatyuk, S.P. Lobastov, M.M. Romyantsev, A.V. Schipunov, A.V. Shutov, I.V. Slepnev, V.M. Slepnev, A.V. Terletskiy, S.V. Volgin. Development of the MRPC for the TOF system of the MultiPurpose Detector // Journal of Instrumentation, Volume 11, June 2016.
6. V. A. Babkin, S. N. Bazylev, M. G. Buryakov, S. V. Volgin, V. M. Golovatyuk, A. V. Dmitriev, P. O. Dulov, D. S. Egorov, S. P. Lobastov, V. A. Petrov, M. M. Romyantsev, V. M. Slepnev, I. V. Slepnev, A. V. Terletskiy, I. A. Philippov, A. V. Shutov, A. V. Schipunov, and V. I. Yurevich. The MPD Test Beam Setup for Testing Detectors with the Nuclotron Beams // Instruments and Experimental Techniques, Volume 60, №3, pages 307-313, 2017.
7. O. V. Rogachevsky, A. V. Bychkov, A. V. Krylov, V. A. Krylov, A. A. Moshkin & V. V. Voronyuk. Software Development and Computing for the MPD Experiment // Physics of Particles and Nuclei, Volume 52, pages 817–820, 2021.

МАССОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ МАСС ЯДЕР

А. П. Ивлева¹, Т. Ю. Третьякова^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: ivleva.ap19@physics.msu.ru

На сегодняшний день известно около 3500 ядер, но предполагается, что число ядер должно быть около 7000. Характеристики неизвестных изотопов, в первую очередь их массы, важны как для постановки новых экспериментов, так и для модельных расчетов астрофизических процессов. Особенно актуальна информация в области трека γ -процесса [1].

В работе обсуждаются модельные соотношения, которые могут быть использованы для предсказания масс ядер. Такие соотношения должны быть достаточно гладкими, не чувствительными к оболочечным эффектам. Многие массовые соотношения построены на основе формул для остаточного нейтрон-протонного взаимодействия Δ_{np} , связывающей энергии связи 4 близко расположенных ядер [2]:

$$\begin{aligned} \Delta_{np}(N, Z) &= S_{np}(N, Z) - (S_p(N-1, Z) + S_n(N, Z-1)) = \\ &= B(N, Z) + B(N-1, Z-1) - B(N, Z-1) - B(N-1, Z), \end{aligned} \quad (1)$$

где S_{np} , S_p и S_n – энергии отделения пары np , протона и нейтрона, а $B(N, Z)$ – энергия связи ядра.

Для описания np -взаимодействия также предложено другое соотношение δV_{np} [3]:

$$\delta V_{np}(N, Z) = \begin{cases} \frac{1}{4} [B(N, Z) - B(N, Z-2) - B(N-2, Z) + B(N-2, Z-2)], & NZ: ee \\ \frac{1}{2} [B(N, Z) - B(N, Z-1) - B(N-2, Z) + B(N-2, Z-1)], & NZ: eo \\ \frac{1}{2} [B(N, Z) - B(N, Z-2) - B(N-1, Z) + B(N-1, Z-2)], & NZ: oe \\ B(N, Z) - B(N, Z-1) - B(N-1, Z) + B(N-1, Z-1), & NZ: oo \end{cases} \quad (2)$$

В работе рассмотрены зависимости Δ_{np} и энергий отделения протонов и нейтронов от числа нейтронов для цепочек изотопов кремния, алюминия и олова, а также зависимости δV_{np} от числа нейтронов для алюминия и олова на основе экспериментальных данных энергий связи АМЕ 2020 и энергий связи, рассчитанных в модели жидкой капли и микроскопическом подходе Хартри-Фока. Величины Δ_{np} и δV_{np} слабо чувствительны к оболочечным эффектам, но для них присутствует резкий скачок при $N=Z$, который проявляется у ядер с $A \leq 60$.

Также интересны соотношения Гарви-Келсона [4], с которых в 60-е годы началось применение локальных массовых соотношений:

$$\begin{aligned} -B(N+2, Z-2) + B(N, Z) - B(N, Z-1) + B(N+1, Z-2) - B(N+1, Z) + B(N+2, Z-1) &= 0 \\ -B(N, Z-2) + B(N+2, Z) - B(N+2, Z-1) + B(N+1, Z-2) - B(N+1, Z) + B(N, Z-1) &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

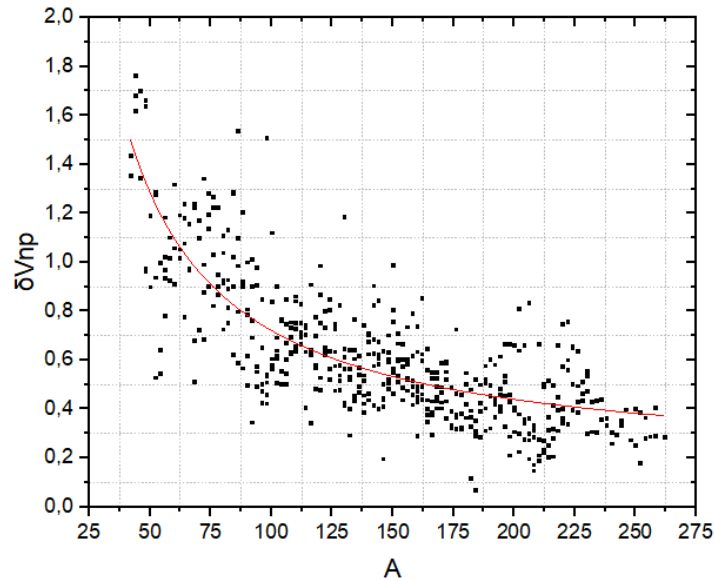


Рис. 1. Аппроксимация $C_1 + C_2 \cdot A^\gamma$ зависимости величины $\delta V_{np}(A)$, $A > 40$, без учета нечетно-нечетных ядер и ядер с $N=Z$.

На основе современных данных по массам ядер (AME 2020) была осуществлена проверка истинности этих соотношения, а именно, определен разброс соотношений (3) около 0. Для ядер с $A > 40$ разброс достигает ± 2 МэВ, отклонения для магических ядер укладываются в этот диапазон. Данный результат поможет в дальнейшем использовать соотношения Гарви-Келсона для сравнения с эффективностью других массовых соотношений.

Массовое соотношения δV_{np} отличается существенно меньшим разбросом и может быть аппроксимировано гладкой кривой $\delta V_{np}(A) = C_1 + C_2 \cdot A^\gamma$ (рис.1), где C_1 , C_2 и γ – подгоночные параметры. Для $A > 40$ их значения: $C_1 = 0,15703 \pm 0,01781$, $C_2 = 56,40215 \pm 1,92661$ и $\gamma = -1$.

В работе получены новые аппроксимации зависимостей $\delta V_{np}(A)$ и $\Delta_{np}(A)$, которые в дальнейшем могут быть использованы для предсказания масс ядер.

[1] V.V Negrebetskiy et al. Proceedings of Science, No. 333 (2022), p. 2

[2] V. A. Kravtsov, Sov. Phys. JETP, 36(9) (1959), p.871

[3] P. Van Isacker, D. D. Warner, and D. S. Brenner, Phys. Rev. Lett., 74 (1997), p. 4607

[4] I. Kelson and G. T. Garvey. Phys. Rev. Lett. (1966), p. 197

ПРЕДСКАЗАНИЕ ПЕРИОДОВ ПОЛУРАСПАДА СВЕРХТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Д. Ф. Байрамов¹, Т. Ю. Третьякова^{1,2}

^{1,2}Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет,
Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

²Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В.Скобельцына, Москва, Россия

E-mail: daniel.bayramov.02@mail.ru

Изучение ядер тяжелее урана является важной областью ядерной физики. Особенно актуальны исследования в области сверхтяжелых элементов [1]. Экспериментальное получение изотопов сверхтяжелых элементов - сложная задача, которая требует предварительных оценок свойств неизвестных изотопов, в частности, их времени жизни.

В данной работе рассмотрены формулы для предсказания периодов полураспада трансурановых элементов. Для предсказания периода α -распада мы используем следующее соотношение формула [2]:

$$\lg T_{\alpha}^{ph}(Z, N) = aZ(Q_{\alpha} - \bar{E}_i)_{\alpha}^{-1/2} + cZ + d, \quad (1)$$

где a , b и c - параметры, получаемые подгонкой по известным экспериментальным данным, значения приведены в таблице. E_i - средняя энергия возбуждения квазичастичного нуклона при α -распаде, где для нечетно-четных ядер $\bar{E}_p = 0.113$ МэВ, для четно-нечетных $\bar{E}_n = 0.171$ МэВ, для четно-четных $\bar{E} = 0$ МэВ и для нечетно-нечетных $\bar{E}_{np} = \bar{E}_p + \bar{E}_n$, Q_{α} - энергия α -распада ядра (Z, N).

Мы провели новую подгонку коэффициентов в формуле (1) на основе более современных данных базы NuDat [3] по периодам полураспада по альфа-каналу. В таблице приведены новые значения параметров. Также в таблице приведены среднеквадратичные отклонения экспериментальных данных от первоначальной и новой формул, видно, что использование новых данных позволило существенно уточнить параметризацию.

Таблица 1. Коэффициенты параметризации формулы (1) и среднеквадратичные отклонения экспериментальных данных от аппроксимации (ско).

| | a | b | c | ско |
|--------------|---------|-----------|---------|-------|
| Работа[2] | 1.5372 | -0.1607 | -36.573 | 0.315 |
| Наши расчеты | 1.59487 | -0.142858 | -40.748 | 0.061 |

На рис. 1 представлено сравнение экспериментальных логарифмов периодов полураспада по альфа-каналу элементов с $Z = 92 - 108$ и полученных аппроксимаций. Экспериментальные значения обозначены точками, и видно, что в основном точки лежат на кривых или близко к ним, что позволяет говорить о применимости этой формулы для предсказания периодов полураспада неизвестных изотопов данных элементов, а также более тяжелых ядер.

Аналогичная работа проводится по получению аппроксимаций для предсказания периодов полураспада по каналу спонтанного деления.

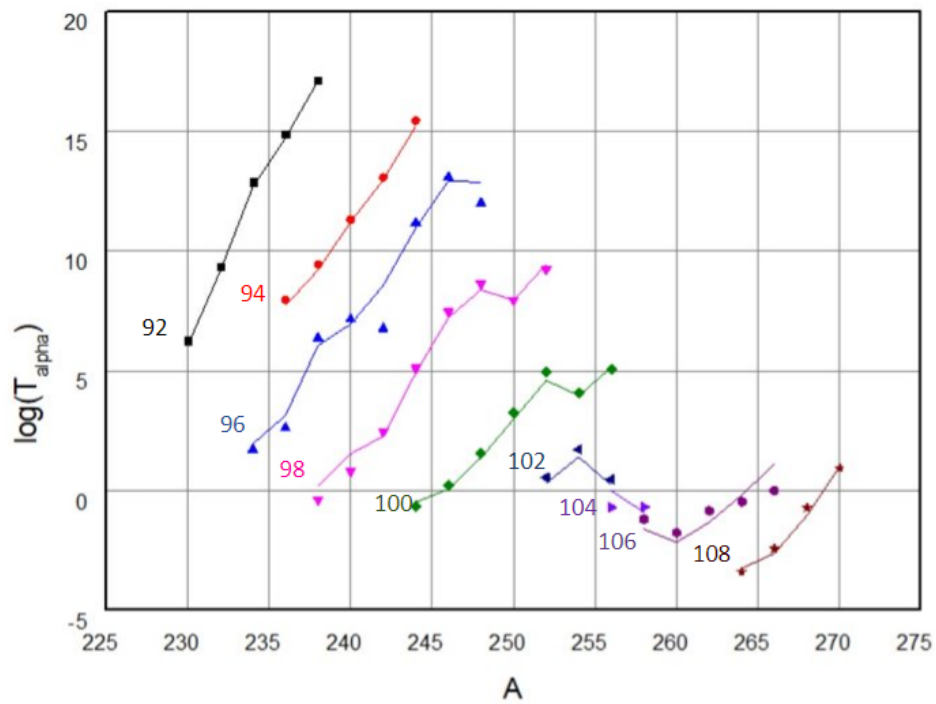


Рис.1. Логарифм периода полураспада сверхтяжелых элементов по каналу α -распада в зависимости от числа нуклонов для $Z = 92 - 108$.

1. F.P.Heßberger, Eur.Phys. A 53 (2017) 75.
2. A.Parkhomenko, A.Sobiczewski Acta Phys.Pol.B, 36 (2005) 3095.
3. <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3/>.

АНАЛИЗ СОБЫТИЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АНТИНЕЙТРИНО В ДЕТЕКТОРЕ iDREAM

М.А. Стриж^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия

E-mail: mikhailstrizh1525@gmail.com

Детектор iDREAM (industrial Detector for REactor Antineutrino Monitoring) создан совместными усилиями специалистов НИИЯФ имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова и НИЦ Курчатовский институт и является уникальной и не имеющей аналогов в Европе установкой, которая может применяться для фундаментальных и прикладных исследований, а также для обучения студентов. Помимо фундаментальных исследований, измерение антинейтринного спектра может также быть применено для решения важных практических задач, таких как дистанционный контроль и диагностика внутриреакторных процессов для повышения безопасности эксплуатации ядерных установок и подтверждения штатных (легитимных) режимов их работы, а также в качестве контртеррористической деятельности, направленной на обеспечение гарантий нераспространения ядерных материалов.

Концепция детектора заключается в использовании простой конструкции и хорошо зарекомендовавших себя технологий, что обеспечивает простоту изготовления и высокую ремонтпригодность такого детектора. Ввод детектора в эксплуатацию был завершён в 2021 году, и начался сбор данных в потоке антинейтрино от реактора Калининской АЭС (Россия). Принципиальным отличием iDREAM является то, что это первый промышленный спектрометр антинейтрино, предназначенный для мониторинга энергетических ядерных реакторов нейтринным методом.

Технология детектирования антинейтрино по реакции обратного бета-распада в жидких органических сцинтилляторах является наиболее удобным на сегодня методом регистрации антинейтринного излучения, позволяющим регистрировать как интенсивность, так и спектральные характеристики излучения. Именно этот метод реализован в детекторе iDREAM. Антинейтрино регистрируется в детекторе методом задержанных совпадений, основным преимуществом которого является тот факт, что продукты реакции можно регистрировать в области энергий выше естественного радиоактивного фона. Первое событие наступает при ионизации сцинтиллятора позитроном, которое производит свет, а также происходит поглощение гамма-квантов от аннигиляции позитрона. Второе событие вызывается поглощением нейтрона ядром гадолиния или водородом, с испусканием гамма-квантов. Зная энергии, выделяемые позитроном и нейтроном, а также учитывая тот факт, что эти события разделены очень малым промежутком времени, можно применить метод задержанных совпадений для регистрации антинейтрино. К сожалению, вышеуказанным условиям удовлетворяют не только события обратного бета-распада. Основные источники фоновых событий эксперимента можно разделить на две категории: инструментальный фон, который можно исключить из наблюдения при помощи специальных критериев отбора, и остальные источники, величина вкладов которых измеряется напрямую или оценивается на основе моделирования. Также необходимо учитывать вклад случайных событий, удовлетворяющих критериям отбора событий реакции обратного бета-распада, но являющихся причинно-несвязанными.

Автором выработаны устойчивые критерии отбора событий, получены предварительные результаты по антинейтринным взаимодействиям в детекторе, разработаны алгоритмы анализа и обработки экспериментальных данных iDREAM.

РАЗВИТИЕ БИБЛИОТЕКИ TALYSLIB

Г. В. Пампушик¹, Н.А. Фёдоров³, Т. Ю. Третьякова^{1,2}

¹*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия,*

²*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына,
Москва, Россия*

³*Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ), Дубна, Россия*

E-mail: pampushik.g@gmail.com

Исследование нейтрон-ядерных реакций имеет большое значение для науки и техники. Корректная информация об особенностях этих процессов необходима для моделирования ядерно-физических установок и планирования экспериментов. На основе экспериментальных данных, получаемых при изучении нейтрон-ядерных реакций, могут быть уточнены параметры теоретических моделей, которые впоследствии могут быть использованы для расчета свойств и других процессов. Однако использование доступных экспериментальных данных для оптимизации параметров модели, затрудняется тем, что они находятся в неудобном для автоматизации формате. В последние годы появились программы, позволяющие проводить расчеты с использованием большого числа различных теоретических подходов, например TALYS [1]. Данная программа позволяет моделировать нейтрон-ядерные реакции и содержит подробную базу данных о структуре атомных ядер, основанную на библиотеке RIPL-3. Результаты вычислений с помощью TALYS обычно хорошо согласуются с экспериментальной информацией. Для упрощения доступа к результатам расчётов и базе данных TALYS, разрабатывается TalysLib, объектно-ориентированная C++ библиотека, основанная на ROOT. Она может выполнять следующие операции:

- 1) Генерация входных файлов TALYS,
- 2) Считывание данных о структуре ядра из базы данных TALYS,
- 3) Преобразование данных к удобному для использования в программе виду,
- 4) Запуск TALYS с заданными параметрами,
- 5) Подбор параметров модели с помощью минимизатора MINUIT,
- 6) Визуализация и сохранение данных с помощью программной среды ROOT.

Целью текущей работы является автоматизация работы TalysLib с экспериментальными данными. Существует несколько способов это сделать:

- 1) Использовать данные из EXFOR [1];
- 2) Использовать данные из EXFOR в формате C4;
- 3) Использовать данные из EXFORTABLES [2];

Стандартный формат EXFOR не удобен для автоматической обработки, поэтому лучше использовать формат C4 или базу данных EXFORTABLES. Формат C4 представляет собой набор экспериментальных данных с фиксированной шириной и столбцов. В отличие от формата EXFOR, в C4 каждая строка представляет одну точку экспериментальных данных, что упрощает сортировку и сравнение. EXFORTABLES – это база данных со структурой каталогов, созданная на основе базы данных EXFOR. Структура каталогов EXFORTABLES представляет данные EXFOR в более легкодоступном виде: налетающая частица/элемент/масса/реакция. Оба формата хорошо подходят для обработки так как содержат табулированные экспериментальные данные с фиксированной шириной, однако в них есть ошибки, которые необходимо исправить. Данные формата C4 для неупругого рассеяния нейтронов имеют ENDF [4] код MT=51 независимо от возбуждаемого состояния, а в файлах EXFORTABLES были обнаружены ошибки в идентификации ядерных состояний.

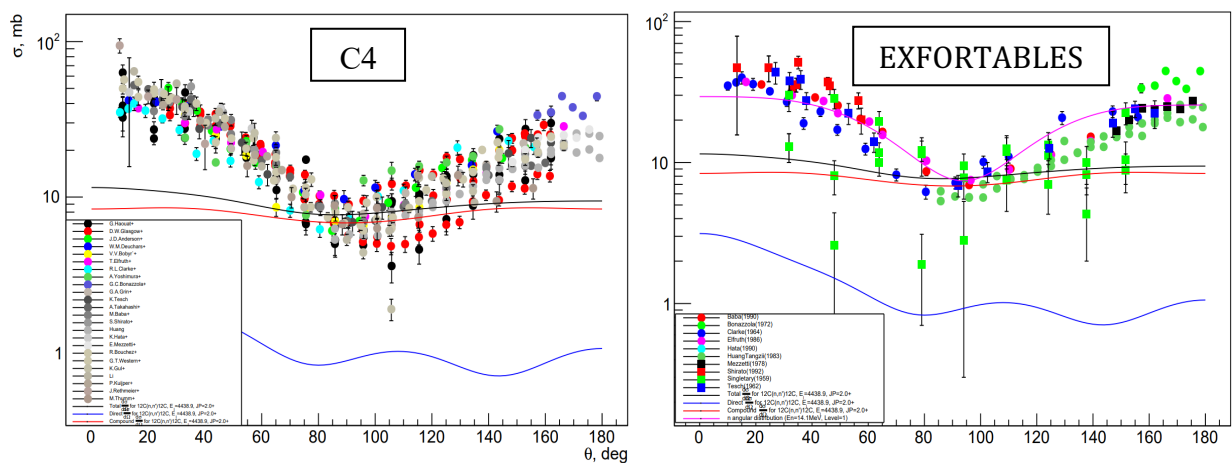


Рис. 1. Пример обработки форматов C4 и EXFORTABLES.

Также для более удобного использования TalysLib, на языке python с использованием библиотеки flask, разрабатывается веб-интерфейс. Данный интерфейс позволяет задавать ядро мишень, тип налетающей частицы и её энергию, а также параметры оптического потенциала. Результат работы представляется в виде графиков угловых распределений рассеянных частиц.

В докладе будут обсуждаться новые возможности TalysLib, а также способы извлечения экспериментальных данных.

1. Koning A. J., Hilaire S., Duijvestijn M. C. «TALYS-1.0» // Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology. EDP Sciences, 2007. С. 211—214
2. A.J. Koning, EXFORTABLES-1.0: An experimental nuclear reaction database based on EXFOR, IAEA NDS Document Series IAEA(NDS)-235, December 2020
3. Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR), <https://www-nds.iaea.org/exfor/>
4. Evaluated Nuclear Data File (ENDF), <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ АВТОРОВ

| | |
|--------------------------|------------------------|
| Авдюхина В.М. | 80 |
| Алехина Ю.А. | 54 |
| Алиев Р.А. | 78 |
| Андреев А.В. | 40 |
| Аристова Н.А. | 61 |
| Бабкин В. | 90 |
| Байрамов Д.Ф. | 94 |
| Балакшин Ю.В. | 30, 60 |
| Банникова И.И. | 70 |
| Барышников В. | 90 |
| Басов В.А. | 26 |
| Белемишев М.К. | 80 |
| Бельшев С.С. | 78 |
| Бессмертный Д.Р. | 32 |
| Близнюк У.А. | 63, 65, 72, 74, 76, 80 |
| Болотник Т.А. | 80 |
| Борщеговская П.Ю. | 63, 65, 72, 74, 76, 80 |
| Браун А.В. | 72 |
| Бузанов О.А. | 58 |
| Буздавин А.П. | 53 |
| Бужин С. | 90 |
| Бурдыко А. | 90 |
| Бурцев А.А. | 18, 20, 22, 24 |
| Буряков М. | 90 |
| Валиуллин В.В. | 11 |
| Винтайкин И.Б. | 28 |
| Воронин Р.И. | 51 |
| Воронина Е.В. | 36 |
| Голанов А.В. | 82 |
| Головатюк В. | 90 |
| Гордонова И.К. | 65 |
| Горелкин П.В. | 34 |
| Горлачев Г.Е. | 82 |
| Градов О.В. | 38 |
| Грановский А.Б. | 54 |
| Гребенев В.В. | 20 |
| Грум-Гржимайло А.Н. | 43, 45, 47 |
| Грызлова Е.В. | 43, 47 |
| Гудкова О.Е. | 63 |

| | |
|--------------------------|----------------|
| Джолос Р.В. | 88 |
| Дмитриев А. | 90 |
| Дроник В. | 90 |
| Дулов П. | 90 |
| Елисеев Н.Н. | 18, 20, 22, 24 |
| Ерофеев А.С. | 34 |
| Жакетов В.Д. | 53 |
| Жаринов И.Ф. | 68 |
| Забелина Е.В. | 58 |
| Завильгельский А.Д. | 60 |
| Золотов С.А. | 74, 76 |
| Зубрицкая Я.В. | 80 |
| Ибрагимова Е.М. | 54 |
| Иванова И.П. | 61 |
| Иванцова В.С. | 65 |
| Ивлева А.П. | 92 |
| Иешкин А.Е. | 32 |
| Ионин В.В. | 18, 20, 22, 24 |
| Ипатова В.С. | 65, 72 |
| Калмыков С.Н. | 42, 49 |
| Касимова В.М. | 58 |
| Киданова Е. | 90 |
| Киреев Д.С. | 32 |
| Киселев А.В. | 18, 20, 22, 24 |
| Киселев М.Д. | 43, 45, 47 |
| Козлова Е.К. | 63 |
| Козлова Н.С. | 58 |
| Колганова Е.А. | 88 |
| Костюченко В.В. | 70 |
| Кречетов Н.Д. | 74, 76 |
| Кувандиков О.К. | 54 |
| Кузенкова А.С. | 49 |
| Кузнецов А.А. | 78 |
| Кутлусурин И.Н. | 32 |
| Лотин А.А. | 18, 20, 22, 24 |
| Лыкова Е.Н. | 70 |
| Львов К.В. | 6 |
| Мардыбан Е.В. | 88 |
| Мардыбан М.А. | 87 |
| Марченко О.М. | 30, 34 |
| Межетова И.Т. | 63 |

| | |
|-------------------------|----------------|
| Миннебаев Д.К. | 30, 34 |
| Михалевский В.А. | 18, 20, 22, 24 |
| Морозов И.В. | 56 |
| Муллахметов И.Р. | 13 |
| Мягков Д.А. | 84 |
| Надирадзе А.Б. | 11 |
| Назаров А.В. | 60 |
| Невзоров А.А. | 18, 20, 22, 24 |
| Нестеренко В.О. | 87 |
| Никитенко Ю.В. | 53 |
| Никитин С.П. | 16 |
| Никитина З.К. | 65 |
| Никитченко А.Д. | 72 |
| Новикова Е.А. | 70 |
| Пампушик Г.В. | 97 |
| Перваков К.С. | 56 |
| Перов Н.С. | 54 |
| Петренко А.В. | 53 |
| Петрушанко С.В. | 84 |
| Пискарев И.М. | 61 |
| Плахова Т.В. | 42 |
| Помозова К.А. | 82 |
| Попова М.М. | 43, 47 |
| Пятигор А. | 90 |
| Расулова Ф.А. | 78 |
| Рахманов Е.О. | 56 |
| Рейнхард П.-Г. | 87 |
| Репко А. | 87 |
| Родин И.А. | 72, 80 |
| Романчук А.Ю. | 42, 49 |
| Ромахов С. | 90 |
| Румянцев М. | 90 |
| Салахитдинова М.К. | 54 |
| Светогоров Р.Д. | 42, 49 |
| Смирнова Л.Н. | 86 |
| Смолянин Т. | 90 |
| Соколов С.А. | 74, 76 |
| Соловых А.А. | 36 |
| Спасский А.В. | 58 |
| Спасский Д.А. | 58 |
| Стремоухов С.Ю. | 6 |

| | |
|----------------------|--------------------------------|
| Стриж М.А. | 96 |
| Студеникин Ф.Р. | 74, 76 |
| Сустатова А.Н. | 68 |
| Сычева А.А. | 36 |
| Тетерин Ю.А. | 42 |
| Толстикова С.Ю. | 9 |
| Третьякова Т.Ю. | 92, 94, 97 |
| Тригуб А.Л. | 42, 49 |
| Ушканов В.А. | 61 |
| Фадеев Е.А. | 54 |
| Фадеев Б.А. | 86 |
| Фёдоров Н.А. | 40, 97 |
| Федюнин Ф.Д. | 58 |
| Фурсова Н.Ю. | 78 |
| Хайдуков Ю.Н. | 53 |
| Ханкин В.В. | 78 |
| Хмелевский О.Ю. | 72 |
| Хоменко М.Д. | 24, 51 |
| Храмко К. | 53 |
| Черников А.Н. | 53 |
| Черняев А.П. | 65, 68, 70, 72, 74, 76, 80, 82 |
| Шамаев А.М. | 14 |
| Шемухин А.А. | 30, 34, 60 |
| Шилов А.И. | 56 |
| Шнейдман Т.М. | 88 |
| Шпорин А.Д. | 30, 60 |
| Щербаков А.А. | 68 |
| Юдин С.Н. | 43, 47 |
| Юров Д.С. | 65, 72, 76 |
| Яковлев А.П. | 34 |

Сборник тезисов докладов

XXIII Межвузовской молодежной научной
школы-конференции имени Б. С. Ишханова
«Концентрированные потоки энергии
в космической технике
электронике, экологии и медицине»

23-24 ноября 2022 г.

Под редакцией
А.А. Кузнецова

Издание подготовил к печати
Д.В. Лосев

Работа поступила в ОНИ ...

Издательство «КДУ»
Тел.:(495)638-57-34
www.kdu.ru