



Основные научные результаты за 2021 г. Отделения перспективных разработок

А. В. Титов

Ученый совет НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

17.02.2022

Гатчина



ОТДЕЛЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РАЗРАБОТОК



Гранты ОНР

лаборатория/ отдел		руководитель проекта	название проекта	финансирование проекта по годам, тыс. руб.				
				2018	2019	2020	2021	2022
ЛКХ	РНФ	Титов А.В.	Развитие средств релятивистского моделирования материалов с примесными f-элементами и исследование их электронной структуры	(10 000)		6 000	6 000	(6 000)
ЛКХ	РНФ	Скрипников Л.В.	Теоретическое исследование свойств и структуры ядер с использованием атомно-молекулярных систем		2 000	4 250	4 750	2500
ЛКХ	РНФ	Петров А.Н.	Поиск новой физики на молекулах (+ продолжение)	4 400	4 900	5 500	5 500	(5 500)
ЛКХ	Грант Президента	Скрипников Л.В.	Развитие методов теоретического описания электронной структуры соединений тяжелых элементов для экспериментов по поиску эффектов несохранения четности и свойств, локализованных на ядре	600	600			[5000]
ЛРФ ОПЯФ	РФФИ	Щербаков О.А.	Исследование структуры барьера деления и свойств переходных состояний в нейтронных резонансах		1 000	1 000	1 000	
ЛРФ ОПЯФ	РФФИ	Воробьев А.С.	Угловые распределения и анизотропия осколков при делении тяжёлых ядер нейтронами промежуточных энергий	700	700	700		
ЛКХ	РФФИ	Титов А.В.	Неэмпирический расчет сверхтонкой структуры электронно-возбужденных состояний литий – содержащих гетероядерных димеров щелочных металлов.		720			
ЛКХ	РНФ-DFG	Исаев Т.А.	Несвязывающие молекулярные спиоры и проверка фундаментальной физики на лазерно-охлаждаемых ионах				4 500	(4 900)
ИТОГО:				16 700	8 480	18 170	21 750	(19 000+)



ОТДЕЛЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РАЗРАБОТОК

Договоры ОПР



Отдел	Заказчик	Сумма договоров в 2019г., руб.	Сумма договоров в 2020г., руб.	Сумма договоров в 2021г., руб.
УО	Филиал АО "ОРКК" - "НИИ КП", АО "РНИИ "Электрон-стандарт", АО "РКС", АО "НИИП", ООО "НПЦ "Гранат"	14 138 000,00р.	4 838 400,00	4 838 400,00р.
ЛРФ ОПЯФ	АО "ГНЦ РФ-ФЗИ"	5 000 000,00р.	6 200 000,00	5 600 000,00р.
	ИТОГО:	19 138 000,00р.	11 038 400,00	10 438 400,00р.

Отдел	Заказчик	Предмет договора	Сроки исполнения договора (2021)	Сумма договора, руб.
УО	АО "РНИИ "Электронстандарт"	<i>Работа "Обеспечение испытаний электрорадиоизделий высокоэнергетическими протонами"</i>	22.03.21-31.03.21	691 200,00р.
УО	АО "РКС"		01.03.21-31.08.21	1 382 400,00р.
УО	ООО "ГНЦ "Гранат"		25.10.21-25.11.21	691 200,00р.
УО	АО "НИИП"		20.04.21-30.04.21	691 200,00р.
УО	Филиал АО "ОРКК" - "НИИ КП"		01.02.21-30.04.21	691 200,00р.
УО	Филиал АО "ОРКК" - "НИИ КП"		25.01.21-26.03.21	691 200,00р.
ЛРФ ОПЯФ	АО "ГНЦ РФ-ФЗИ"	<i>НИОКР "Экспер. исследования взаимодействия нейтронов с ядрами актинидов для РФ-библиотеки ядерно-физических данных БРОНД 4-го поколения"</i>	01.01.21-22.10.21 (3-й этап)	5 600 000,00р.
			ИТОГО:	10 438 400,00р.



ОТДЕЛЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РАЗРАБОТОК



Количественный состав работников ОПР по лабораториям/отделам

<u>ОПР: количество работников:</u>	на ноябрь 2020 г.	на январь 2022 г.	Прирост
ОПЯФ (включая 1 сотрудника АУ ОПР)	29	28	-1
ОИТА (включая ЛИВС)	21	22	1
ЛГИИС	17	16	-1
ЛКХ (включая 3-х сотрудников АУ ОПР)	23	23	0
ЛХСУМ (в ОПР с 2021 г.)	-	13	13
Ускорит. отдел (УО), в том числе:	54	46	-8
ЛФТУ	10	7	-3
ЦЭУ	44	39	-5
ВСЕГО:	144	148	4

Средний возраст работников ОПР

<u>ОПР, средний возраст, лет:</u>	на ноябрь 2020 г.	на январь 2022 г.	Прирост
ОПЯФ (включая 1 сотрудника АУ ОПР)	58	58	0
ОИТА (включая ЛИВС)	61	62	1
ЛГИИС	61	62	1
ЛКХ (включая 3-х сотрудников АУ ОПР)	39	40	1
ЛХСУМ (в ОПР с 2021г.)	-	41	0
Ускорительный отдел (УО)	59	60	1
Средний возраст работников ОПР (лет):	56	54	-2



Учёные степени научных сотрудников ОПР в 2021 г. (прирост за год)

ОПР:	Доктора наук (прирост)	Кандидаты наук (прирост)
ОПЯФ	2 (-3)	8 (-1)
ЛКХ	4 (+1)	8 (+1)
ЛГИИС	1	2
ЛФТУ (УО)	-	2 (-1)
ЛИВС (ОИТА)	-	1
ИТОГО:	7 (-2)	21 (-1)



Публикации ОПР за 2021 (2020)

Подразделение	Публикации	WoS/Scopus	РИД
2021 (2020)			
ЛКХ	27 (30)	26[19:Q1] (30)	1 (1)
ОПЯФ (ЛЭПО + ЛРФ + гр.Каманиной)	4+1+10 (6+12+0)	2+0+10 (3+8+0)	2+0.5+0(6+1+0)
УО	8 (7)	4 (4)	1.5 (4)
ОИТА	0 (3)	0 (2)	0 (0)
ЛГИИС	6 (2)	0 (0)	0 (1)
ЛХСУМ	2.33 (2/3 ОНИ)	2.33 (2/3 ОНИ)	0 (0)
<u>ВСЕГО:</u>	58 (61)	44 (45)	5 (13)



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»



ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Россия, 188300, Ленинградская область, г. Гатчина, Орлова роща



УСКОРИТЕЛЬНЫЙ ОТДЕЛ





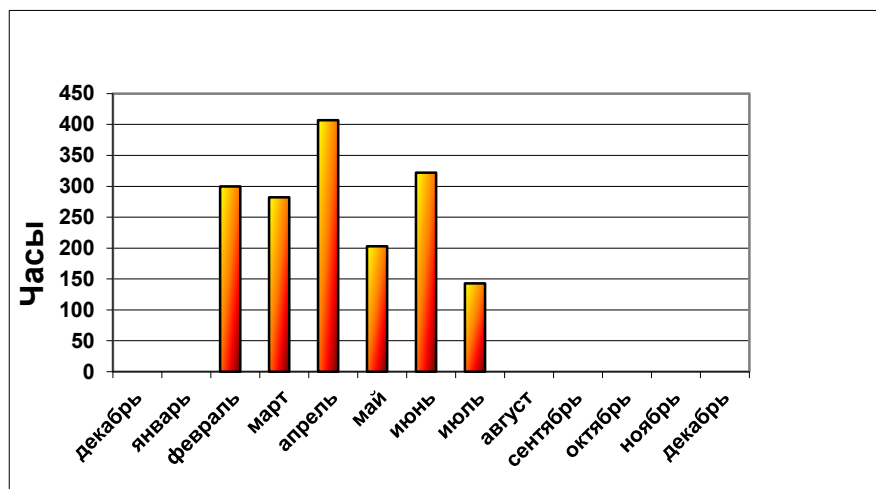
СЦ-1000: с 2009 в перечне уникальных ядерно-физических установок по распоряжению Пр-ва РФ

Параметры синхроциклотрона - энергия, интенсивность, временная структура пучка, а также созданный экспериментальный комплекс определяют его уникальность:

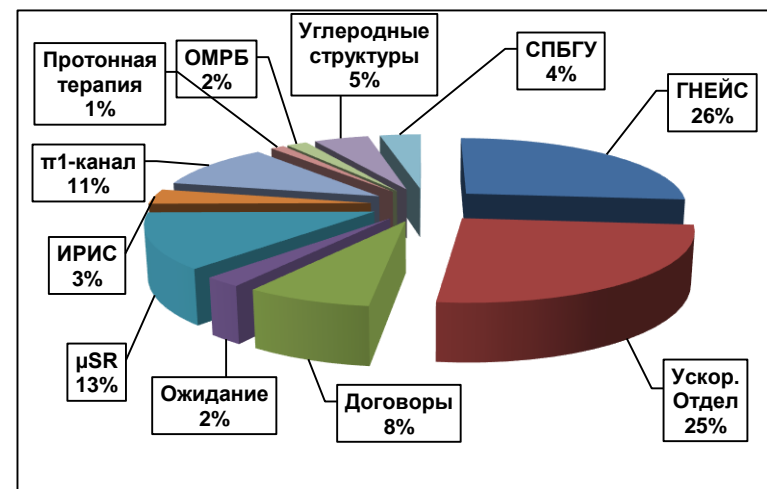
- **Мюонный канал, μ SR-установка, единственная в РФ** предназначенная для изучения структуры вещества на ядерном уровне методом вращения спина мюона;
- **π -мезонный канал высоких энергий - единственный в РФ;**
- **π -мезонный канал низких энергий, единств. в РФ**, обеспечивает $P_{\mu}=28$ МэВ/с (остановки в газах);
- **ИРИС** – масс-сепараторный комплекс, **единственная в РФ** установка для исследований *нейтрон-дефицитных ядер* удаленных от полосы β -стабильности.
На нейтронном пучке СЦ-1000 выполняются работы по получению *нейтрон-избыточных ядер*. Эти работы связаны с программой изучения ядер на РК ПИК (установка ИРИНА);
- **ГНЕЙС** – нейтронный времяпролетный спектрометр - **единственный атмосфероподобный пучок в РФ**. Спектрометр ГНЕЙС расширяет экспериментальные возможности Нейтронного Центра (РК ПИК): к ультрахолодным, холодным и тепловым нейтронам (РК ПИК) добавляется диапазон быстрых нейтронов (ГНЕЙС на СЦ-1000). Позволяет проводить испытания электронных изделий для гражданских и военных летательных аппаратов, эксплуатируемых в верхних слоях атмосферы, на радиационную стойкость. **В мире действуют всего три подобных установки;**
- **МАП** – Магн. Анализатор Пролетный – разреш. 0,1%, **единств. в РФ**, ; **НЭС** – НизкоЭнергет. Спектр-р;
- **Комплекс радиационных испытаний** электронной компонентной базы на радиационную стойкость в протонных и нейтронных пучках - **единственный в РФ;**
- **Комплекс протонной терапии** («гатчинский метод», *единств. работающий не на «пике Брэгга»*)
- **+ облучение протонами углеродных структур (эндофуллеренов: $Te@C_{60} \rightarrow I@C_{60}$).**



Работа ускорителя СЦ-1000 в 2020 - 2021 гг.
(1657 часов за период **ноябрь 2020 - ноябрь 2021**)



СЦ-1000: основные пользователи 2021 г.



В период **октябрь 2021 – январь 2022** проводился **ремонт** высокочастотной системы СЦ-1000. Работы будут продолжены в 2022. Предстоит изготовить два ротора вариатора (12,5 млн), два узла развязки вариаторов по высокому напряжению (заказ уже в ЦЭТО) и других механизмов. Также в планах 2022 замена форвакуумных и бустерного насосов. Работы ведутся.



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»



ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Россия, 188300, Ленинградская область, г. Гатчина, Орлова роща



УСКОРИТЕЛЬНЫЙ ОТДЕЛ

Основные результаты деятельности Ускорительного Отдела за 2021 г.

- Прочитан аспирантам ПИЯФ курс лекций «Введение в ускорители».
- Участие в конференции RuPAC2021: три доклада
- Продолжены и развиты работы по исследованию динамики частиц в Ц-80
- Написаны отзывы на работы НИИЭФА: по протонному циклотрону с вариацией энергии 30-250 МэВ (Артамонов); по циклотронному комплексу многозарядных ионов (Иванов)
- Опубликовано 8 работ (4 SCOPUS) и получены 2 патента



Публикации Ускорительного Отдела за 2021:

1. D.A. Amerkanov, S.A. Artamonov†, E.M. Ivanov, G.A. Riabov, V.A. Tonkikh. “Focusing Properties of the Magnetic Structure of Isochronous Cyclotrons with High Spiraling Angle of Pole Tips”, in Proc. 27th Russian Particle Accelerator Conf. (RuPAC’21), Alushta, Russia, 26 September – 2 October 2021, pp. 219- 221. doi:10.18429/JACoW-RuPAC2021-MOPSA53.
2. D.A. Amerkanov†, E.M. Ivanov, G.A. Riabov, V.A. Tonkikh. “Calculation and Optimization of High-Energy Beam Transfer Lines by the Monte Carlo Method”, in Proc. 27th Russian Particle Accelerator Conf. (RuPAC’21), Alushta, Russia, 26 September – 2 October 2021, pp. 262- 264. doi:10.18429/JACoW-RuPAC2021-TUPSB16.
3. D.A. Amerkanov, S.A. Artamonov, E.M. Ivanov, V.I. Maximov, G.A. Riabov, V.A. Tonkikh†. “Conceptual Project of the Proton Beam Lines in the Nuclear Medicine Project of the "Kurchatov Institute" – PNPI”, in Proc. 27th Russian Particle Accelerator Conf. (RuPAC’21), Alushta, Russia, 26 September – 2 October 2021, pp. 189- 191. doi:10.18429/JACoW-RuPAC2021-MOPSA44.
4. A. Y. Polyakov, I. V. Shchemerov, A. A. Vasilev, A. I. Kochkova, N. B. Smirnov, A. V. Chernykh, E. B. Yakimov, P. B. Lagov, Yu. S. Pavlov, E. M. Ivanov, O. G. Gorbatkova, A. S. Drenin, M. E. Letovaltseva, Minghan Xian, Fan Ren, Jihyun Kim, and S. J. Pearton. “1 GeV proton damage in β -Ga₂O₃”, *J. Appl. Phys.* **130**, 185701/1-7 (2021); doi: 10.1063/5.0068306.



Патенты за 2021:

1. **Иванов Е.М., Михеев Г.Ф.** Патент на изобретение № 2747217 «Способ радиационного облучения мишеней большого размера на протонном пучке синхроциклотрона». Заявка № 2020135803, приоритет изобретения 29 октября 2020 г. Дата государственной регистрации в Государственном реестре изобретений Российской Федерации 29 апреля 2021 г.
2. **Воробьев А.С., Иванов Е.М., Михеев Г.Ф., Щербаков О.А., Козюков А.Е., Чубунов П.А., Бычков А.С.** Патент на изобретение № 2761406 «Устройство для радиационного облучения и испытания надежности объектов авиакосмического назначения к воздействию потоков нейтронов с использованием синхроциклотрона». Заявка № 2021109217, приоритет изобретения 02 апреля 2021 г. Дата государственной регистрации в Государственном реестре изобретений Российской Федерации 08 декабря 2021 г.



**Срок эксплуатации Ускорительного комплекса
НИЦ КИ ПИЯФ продлен до 2030 года
при условии ликвидации замечаний до 2024 года.**

НЕОБХОДИМОЕ финансирование работ по продлению срока эксплуатации
СЦ-1000

3.4. По результатам комплексного обследования комплекса СЦ сделан вывод о возможности продления срока его эксплуатации сверх назначенного на 10 лет – до 01.04.2030 при условии выполнения до 01.04.2024 ремонтно-восстановительных работ по приведению в работоспособное состояние

Перечень услуг и приобретений	Срок исполнения	Сметная стоимость, тыс. руб.
Стоимость товаров и услуг только на 2022 г. согласно Программы работ по подготовке комплекса синхроциклотрона к продлению срока эксплуатации от 24.09.2020.	31.12.2022	70 000



Отдел прикладной ядерной физики

<u>лэпо</u>	Научный персонал	Ставки
Соловей В.А.	зав.отд.з.лаб.снс,к/т	1
Кащук А.П.	снс, д.	1
Чеканов В.А.	снс	1
Захаров А.А.	снс	1
Левицкая О.В.	нс	1
Колхидашвили М.Р.	нс,б.уч.ст.	1
Глушкова Т.И	мнс б.уч.ст.	1
Каманина Н.В.	внс, д.	
Кужаков П.В.	нс	

Научно-технический персонал		Ставки
Вавилова И.Г.	зам.зав.отд.	1
Савельева Т.В.	вед.инж-электр.	1
Гапон О.Н.	вед.инж-электр.	1
Попов Г.В.	вед.инж-прогр.	1
Голубев М.А.	инженер-программ. 2 кат.	1
Христочев А.Е.	вед.инж-прогр.	1
Полюшкин А.О.	инженер-элек.1к..	

<u>Технологическо-производственная группа</u>		
Инженерно-технический персонал		Ставки
Баскова Л.В.	инженер 1к.	1
<u>Рабочие</u>		
Честнова Е.Ю.	монт.р/эл.апп.6	1
Цветкова Т.Г.	монт.рад.апп.5	1

<u>лрф</u>	Научный персонал	Ставки
Воробьев А.С.	зав.лаб. к.	
<u>Группа нейтронной спектроскопии</u>		
Воробьев А.С.	з.з.о.,зав.лаб. к.	1
Щербаков О.А.	снс	1
Лихоманова С.В.	нс, б.уч.ст.	
Зубцова Ю.А.	нс	
Тойкка А.С.	ст.лаборант	
Ломова Л.С.	ст.лаборант	
Барнаш Я.В.	ст.лаборант	

<u>Группа радиационной физики полупроводниковых структур</u>		
Вайшне Л.А.	снс	
Шведчиков А.В.	нс, б.уч.ст.	

<u>Научно-технический персонал</u>		
Валиева Е.В.	ст.лаборант	1

<u>Научно-технический персонал</u>		
Валиева Е.В.	ст.лаборант	1

<u>Научно-технический персонал</u>		
Валиева Е.В.	ст.лаборант	1

<u>Опытное производство</u>		
Андреев А.З.	вед.инж.констр.	1

ЛЭПО 2021

Публикации:

1. 2021 IAEA, Vienna Nuclear Fusion, Volume 62, Number 1. Energy confinement in the spherical tokamak Globus-M2 with a toroidal magnetic field reaching 0.8 T. соавторство. В.А.Соловей. SCOPUS.
2. Письма в ЖТФ, 2021, том 47, вып. 24. Измерение температуры электронов плазмы токамака Глобус-М2. соавторство. В.А.Соловей. SCOPUS.
3. X Международная научно-техническая конференция «Низкотемпературные технологии в XXI веке» Новая скважина к подледниковому озеру Восток. Тезисы. А.А.Захаров. РИНЦ.

Конференции:

1. XLVIII МЕЖДУНАРОДНАЯ (ЗВЕНИГОРОДСКАЯ) КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ И УПРАВЛЯЕМОМУ ТЕРМОЯДЕРНОМУ СИНТЕЗУ. - 2 постера. соавторство. В.А.Соловей.
2. 13-я Всероссийская конференция ДИАГНОСТИКА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ (ДВП-13) - 2 доклада. соавторство. В.А.Соловей.
3. New Trends in Nuclear Physics Detectors (NTNPD-2021) Heavy Ion Laboratory, University of Warsaw, Warsaw, Poland – 1 постер. А.П.Кашук.
4. X Международная научно-техническая конференция «Низкотемпературные технологии в XXI веке» - доклад. А.А.Захаров.

Препринты:

ПИЯФ № 3051: Подледниковое озеро Восток Перспективы проникновения. А.А.Захаров.

РИД:

Патент №208207 Проволочный газонаполненный электронный умножитель. А.П.Кашук, О.В.Левицкая.

Патент на изобретение №2751030: Способ бурения ледниковых скважин. А.А.Захаров.

Договора:

Договор на выполнение составной части исследовательской программы (проекта) от 25 ноября 2021 г. № 454-100-1/2021/400/1995 в рамках Соглашения № 075-10-2021-115 от 13 октября 2021 г. Рук. Зам. Зав. ОДНИ ИЦ НТ **Е.В.Алтынбаев**.

Приборная база РК ПИК:

“5 станций”, 1 очередь – D1, SEASANS – детекторные системы и частичная автоматизация.

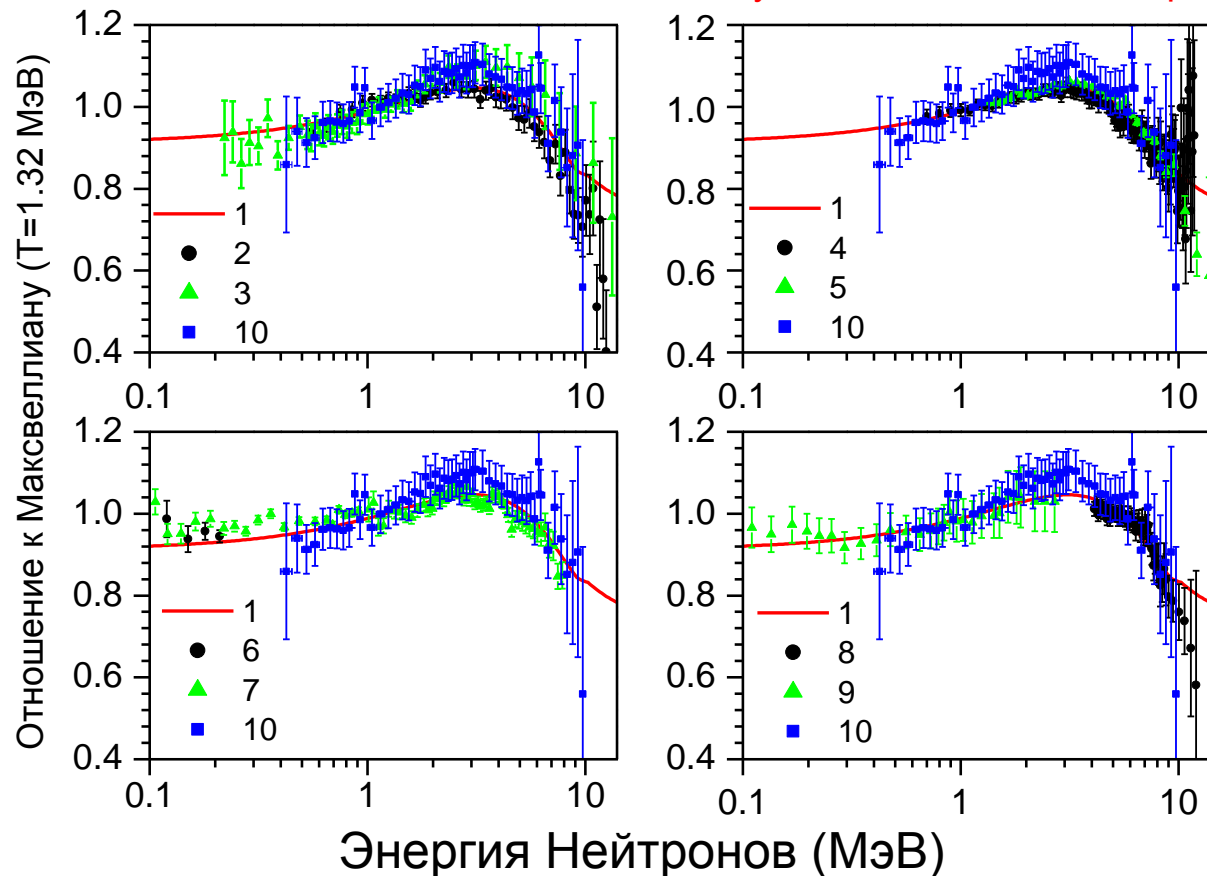
Лаборатория радиационной физики ОПЯФ ОПР

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ в 2021 г.

- Исследования механизма эмиссии “мгновенных” нейтронов деления при низкой энергии возбуждения:
 - Исследование угловых и энергетических распределений нейтронов деления;
 - Измерения энергетических спектров нейтронов деления ^{235}U тепловыми нейтронами (*канал ГЭК-1 реактора ИРТ-Т в Томском Политехническом Университете*). Совместная работа НИЦ КИ – ПИЯФ, ГНЦ РФ - ФЭИ (Обнинск) и ТПУ (Томск).
- Изучение корреляций нейтронов и γ -квантов при делении ядер актиноидов в резонансной области энергий нейтронов (*нейтронный времяпролётный спектрометр ГНЕИС на базе СЦ-1000, Гатчина*);
- Измерения массовых, энергетических и угловых распределений осколков, а также сечений деления актиноидов нейтронами в диапазоне энергий 1-200 МэВ (*нейтронный времяпролётный спектрометр ГНЕИС на базе СЦ-1000, Гатчина*);
- Работы по адаптации стенда ИСП/ГНЕИС (исследование радиационной стойкости ЭКБ) под нужды пользователей и совершенствованию оборудования диагностики нейтронного пучка (*нейтронный времяпролётный спектрометр ГНЕИС на базе СЦ-1000, Гатчина*). Проведение испытаний.

Измерения энергетических спектров нейтронов деления ^{235}U тепловыми нейтронами (реактор ИРТ-Т, ТПУ, Томск)

Сравнение экспериментальных данных по спектру мгновенных нейтронов при делении ^{235}U тепловыми нейтронами с оценкой, приведенной в ENDF/B-VIII.0, и с экспериментальными данными, полученными в настоящей работе.



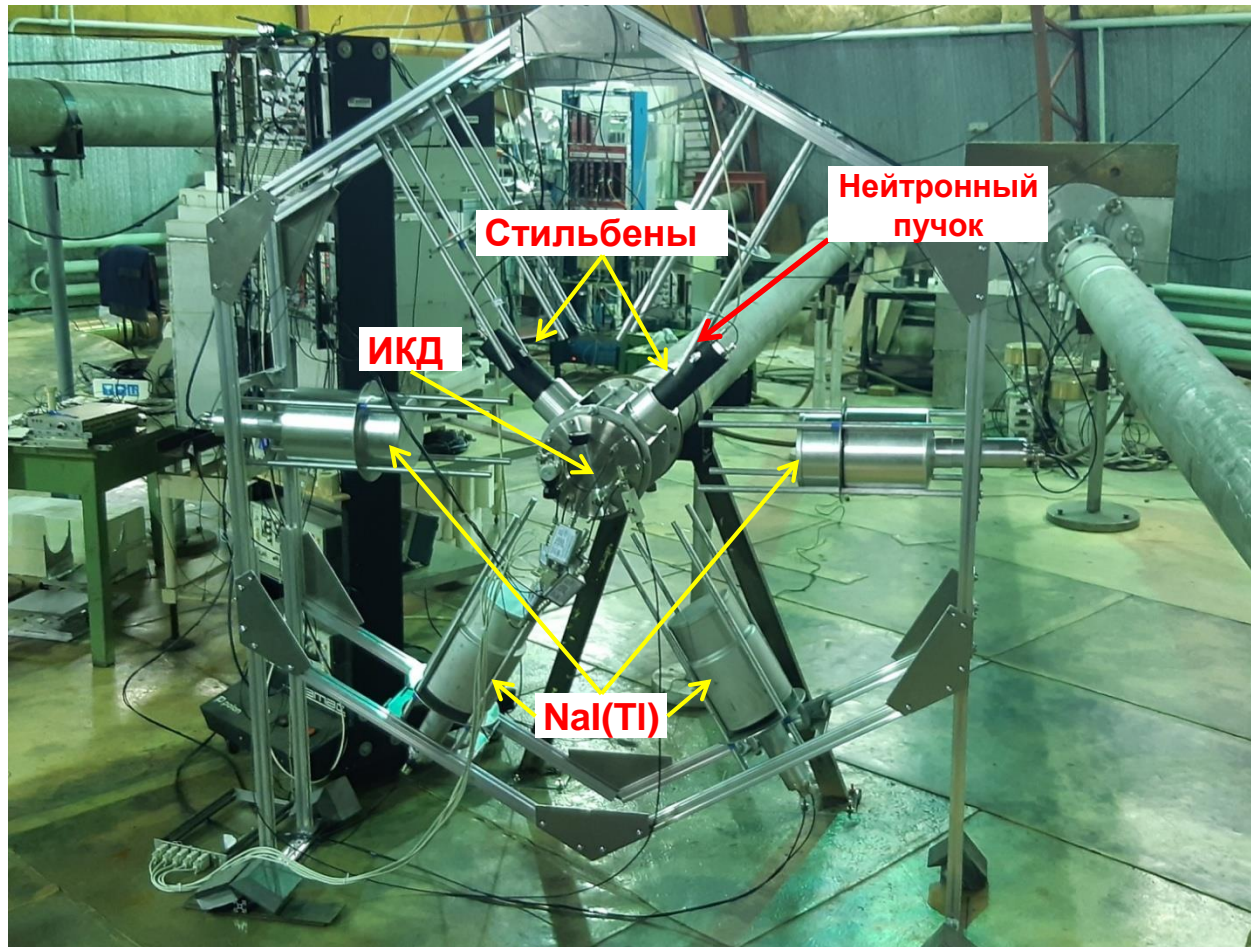
1 – оценка, приведенная в библиотеке ENDF/B/VIII.0;

экспериментальные данные:
2 – A.Gök et al (2018);
3 – A.S.Vorobyev et al (2012);
4 – N.V.Kornilov et al (2010);
5 – Wang Yufeng et al (1989);
6 – A. Lajtai et al (1984);
7 – V.N.Nefedov et al (1983);
8 – B.I. Starostov et al (1983);
9 – A.A. Boytsov et al (1985),
10 – *данные настоящей работы.*

✓ Выполнены абсолютные измерения спектров мгновенных нейтронов деления ^{235}U . Основной вклад в неопределённость полученных данных вносит статистическая точность. Необходимо продолжение измерений.

Изучение корреляций нейтронов и γ -квантов при делении ядер ^{235}U и ^{239}Pu в резонансной области энергий нейтронов (1-300 эВ) (выполняется совместно с ОНИ и ОФВЭ на спектрометре ГНЕЙС)

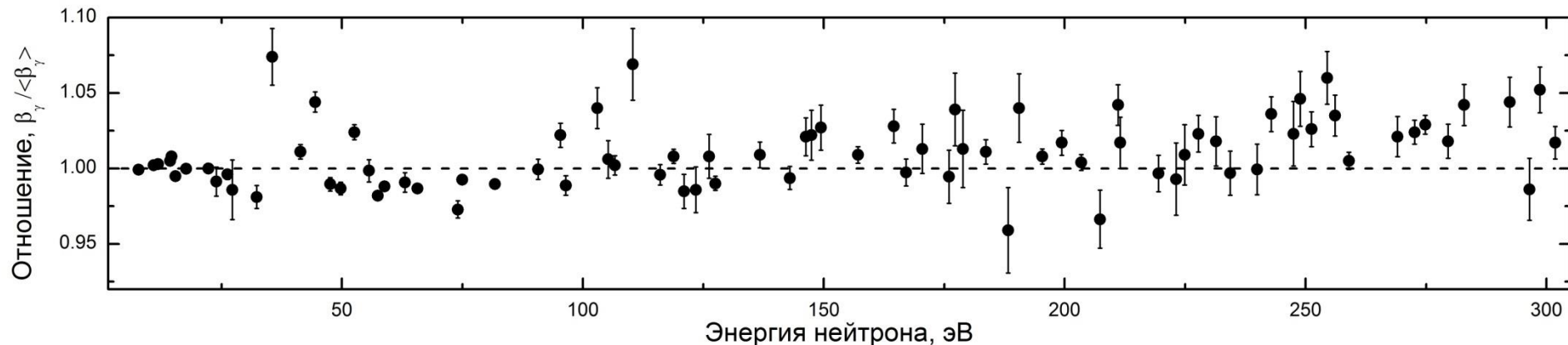
Схема эксперимента



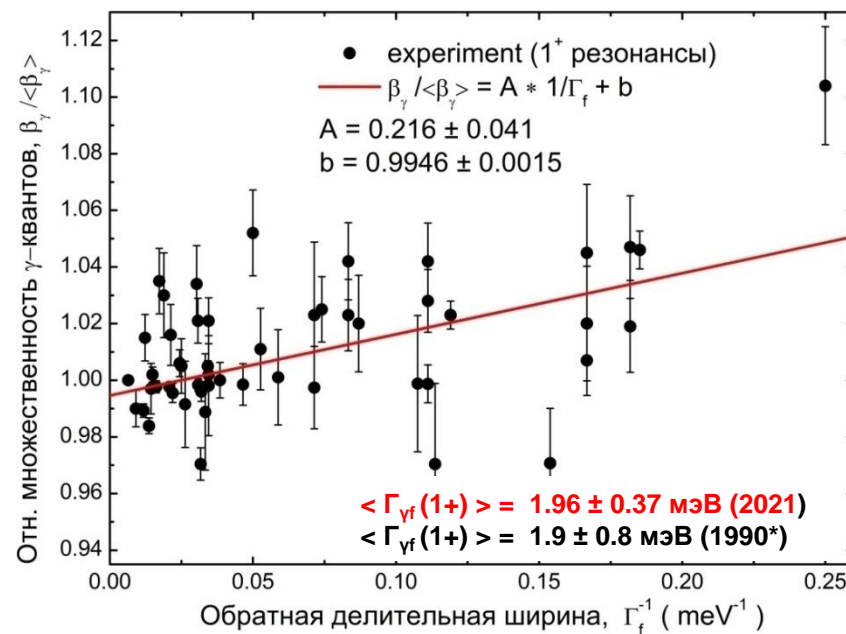
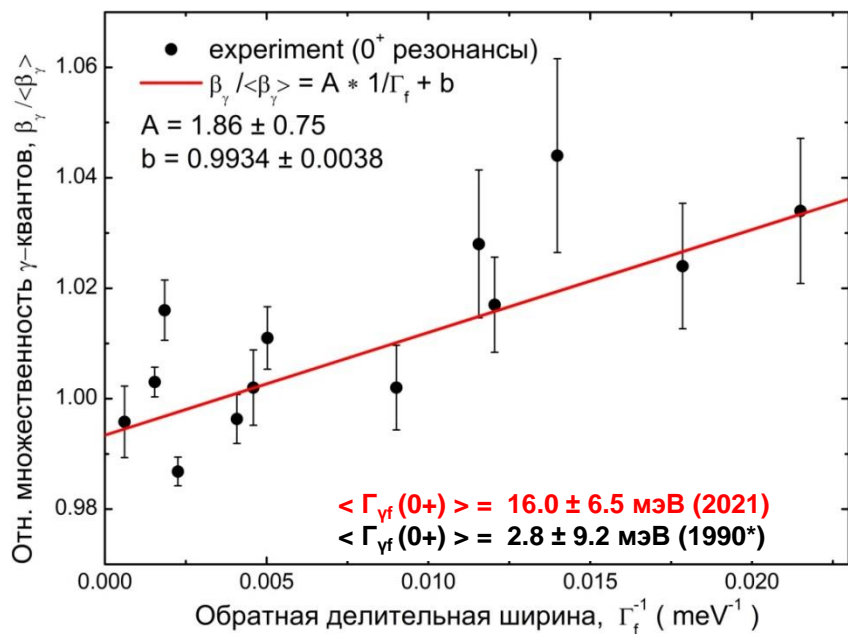
Цели:

- 1) оценка вероятности (парциальной ширины, сечения) (n,γ) -реакции в нейтронных резонансах ^{235}U и ^{239}Pu и спектров предделительных γ -квантов;
- 2) оценка вклада (n,γ) -реакции в нейтронные сечения деления и радиационного захвата для резонансных и быстрых нейтронов;
- 3) оценка радиационной силовой функции и спектра переходных состояний при делении компаунд-ядер ^{236}U и ^{240}Pu .

Изучение корреляций множественности нейтронов и γ -квантов при делении $^{239}\text{Pu}(n,f)$ в резонансной области энергий нейтронов



Корреляция между обратной делительной шириной и множественностью γ -квантов (детектор NaI(Tl))

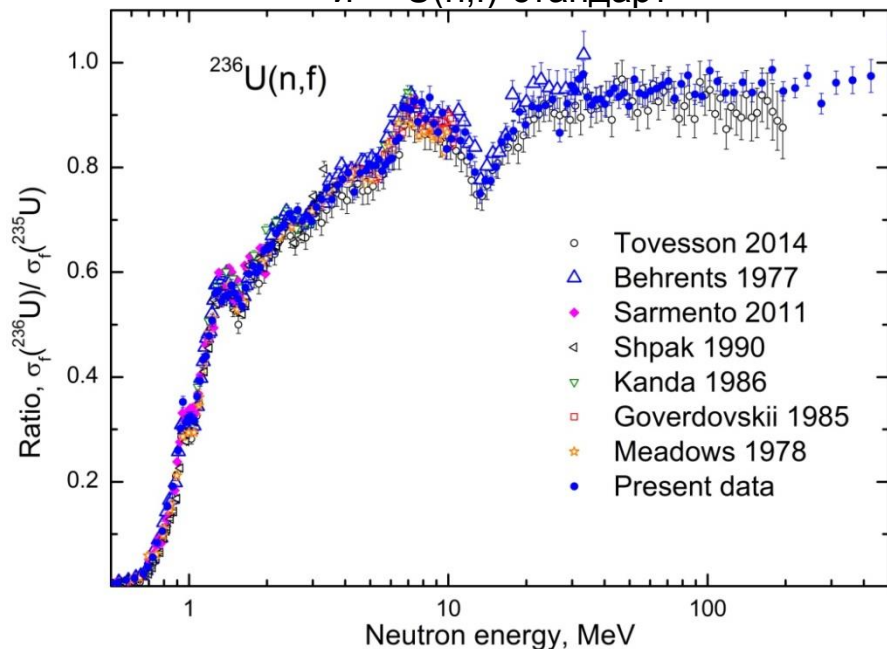


1990* - O.A. Shcherbakov, Sov. J. Part. Nucl. 21 (1990) 177

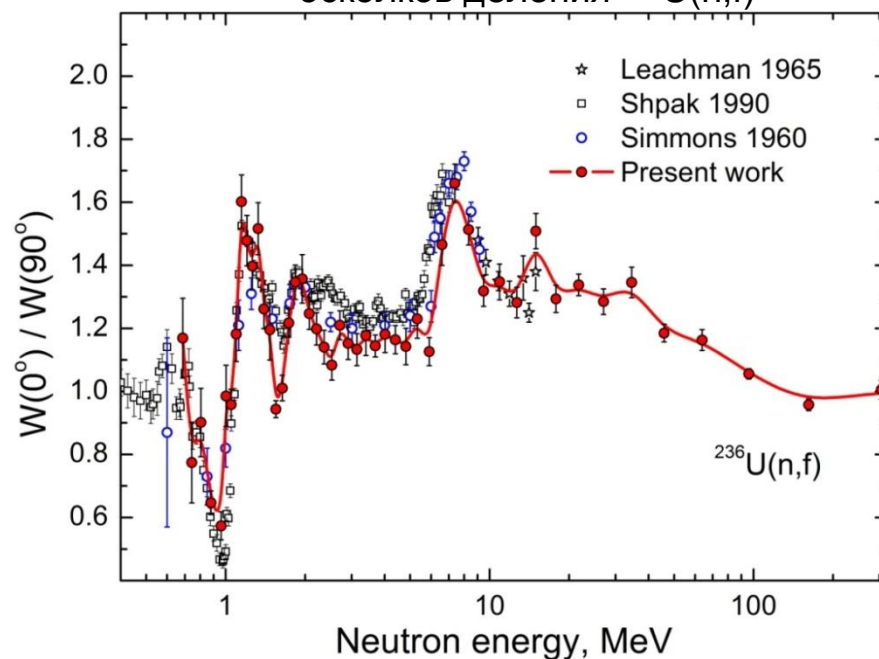
Изучение угловых распределений осколков и сечений деления тяжёлых ядер нейтронами в диапазоне энергий 1-200 МэВ (выполняется совместно с ОНИ и ОФВЭ на спектрометре ГНЕЙС)

Результаты: проведены измерения угловых распределений осколков и сечения деления ^{236}U .

Отношение сечений деления $^{236}\text{U}(n,f)$
и $^{235}\text{U}(n,f)$ -стандарт

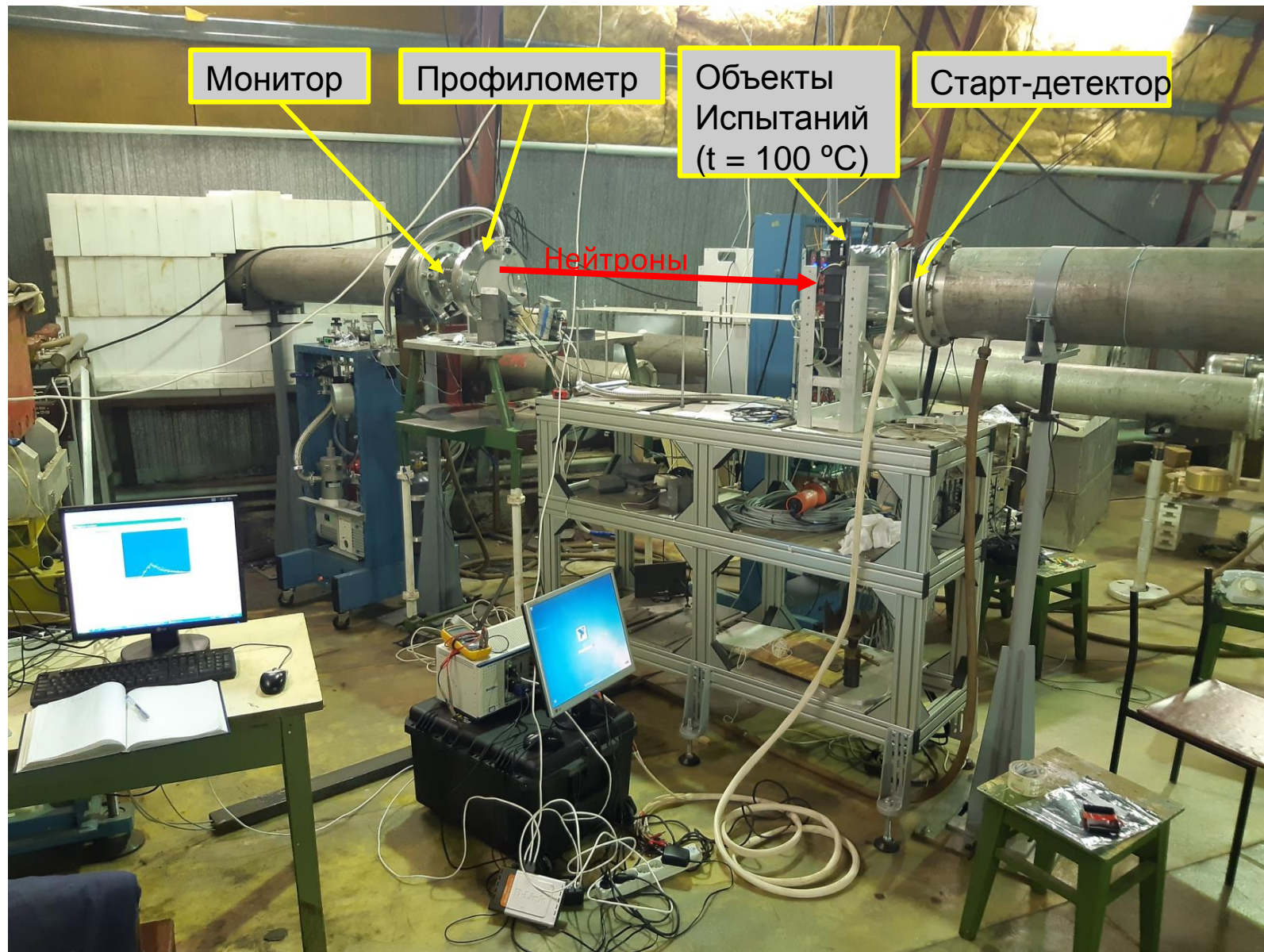


Анизотропия угловых распределений
осколков деления $^{236}\text{U}(n,f)$



- ✓ Угловые распределения осколков деления $^{235}\text{U}(n,f)$ в области энергий нейтронов выше 15 МэВ измерены впервые.
- ✓ Выполненные измерения полностью перекрывают как диапазон 1-20 МэВ (реакторный спектр), востребованный в современных ядерных технологиях и технологиях ближайшего будущего, так и наиболее трудную с экспериментальной точки зрения область 20-200 МэВ, критически важную для развития перспективных ADS-технологий.
- ✓ В настоящее время совместно с Теоретическим отделом НИЦ “Курчатовский институт” (Москва) ведётся теоретический анализ полученных данных.

Исследование радиационной стойкости ЭКБ к нейтронам с атмосфероподобным спектром (ИСНП/ГНЕЙС, Февраль 2021 г)



Лаборатория радиационной физики ОПЯФ ОПР,
НИЦ "Курчатовский институт" - ПИЯФ, Гатчина

Воробьев А.С.

ИТОГИ ЛРФ 2021 года

ГРАНТЫ И ДОГОВОРА

19-02-00116 а – грант РФФИ (2019-2021): “Исследование структуры барьера деления и свойств переходных состояний в нейтронных резонансах” – руководитель Щербаков О.А. (ЛРФ ОЛЯФ ОНР). Выполнялся совместно с ОНИ и ОФВЭ НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ.

Договор с АО “ГНЦ РФ - ФЭИ” № 984-600-2/2019/6659 (2019-2021): “Экспериментальные исследования взаимодействия нейтронов с ядрами актинидов для отечественной библиотеки ядерно-физических данных БРОНД четвёртого поколения” – руководитель Воробьев А.С. (ЛРФ ОЛЯФ ОНР). Выполнялся совместно с АО “ГНЦ РФ-ФЭИ” госкорпорация РОСАТОМ.

ПУБЛИКАЦИИ

По результатам исследований в 2021 г. была опубликована 1 работа и подготовлено к печати 3 работы, также было представлено 2 доклада на конференциях.

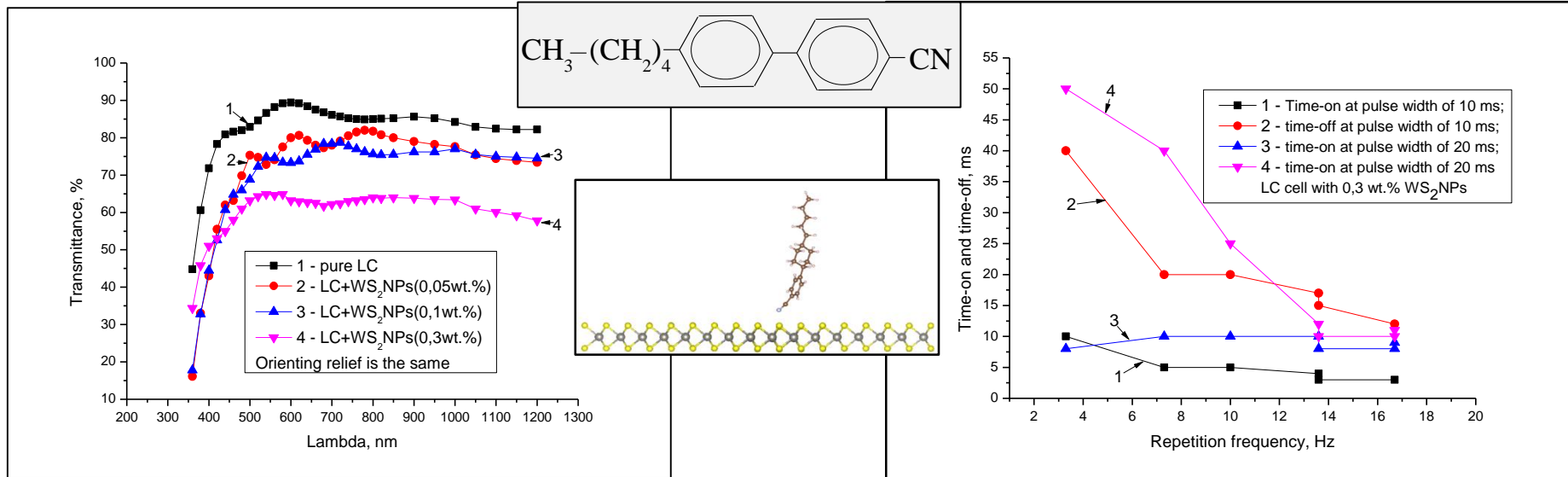
ОТЧЁТ НИОКТР

Рег. № ИКРБС 221110900200-0, дата постановки отчёта на учёт 09.11.2021. “Экспериментальные исследования взаимодействия нейтронов с ядрами актинидов для отечественной библиотеки ядерно-физических данных БРОНД четвертого поколения”.

ПАТЕНТ

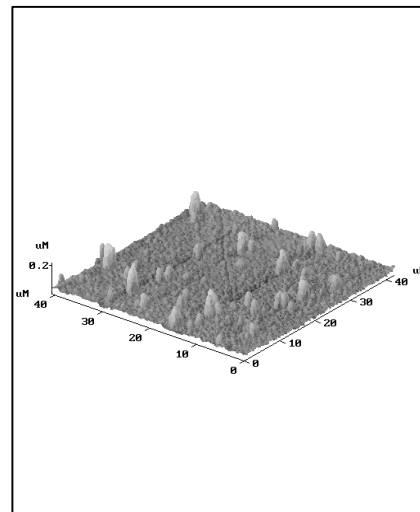
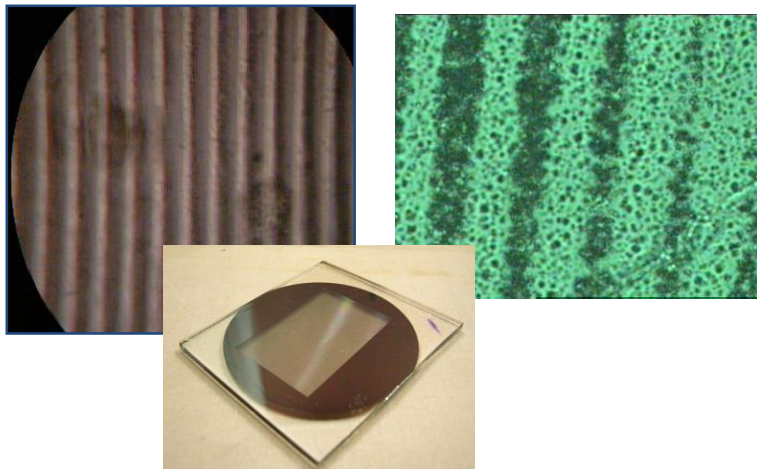
Совместно с УО ОНР подготовлено предложение по модернизации стенда ИСНП/ГНЕЙС для изучения воздействия отдельных нейтронов на ЭКБ авиакосмического назначения (положительное решение РОСПАТЕНТ № 2021109217/07(019910) от 25.10.2021 о выдаче патента на изобретение).

Корреляционные зависимости между спектральными, временными и ориентационными параметрами жидкокристаллических ячеек с WS_2 наночастицами

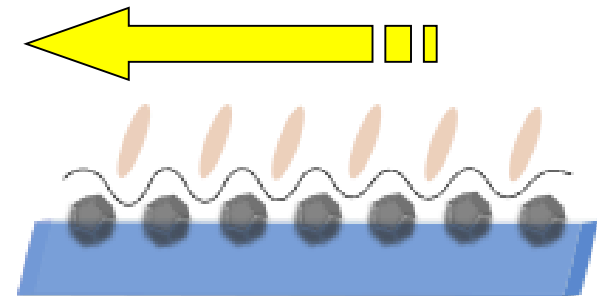


Спектральные зависимости ЖК-структуры, сенсibilизированной наночастицами WS_2 с разной концентрацией: 0 wt.% (кривая 1), 0.05 wt.% (кривая 2), 0.1 wt.% (кривая 3) и 0.3 wt.% (кривая 4).

Временные параметры (время включения t_{on} и выключения t_{off}) ЖК-ячеек с концентрацией наночастиц WS_2 : 0.1 wt.% WS_2 при варьировании длительности импульса питания в зависимости от частоты следования импульсов питания.



Рельефы поверхностей, используемые для ориентирования ЖК-молекул



Упрочнение и просветление полупров. мат-лов ZnS и ZnSe лазерным бесконтактным методом:

Как было ранее отмечено и показано в патентах гр. Каманиной, а также представлено в работе с модификацией физико-химических свойств материалов кристаллической оптики и Фурье-спектроскопии KBr, LiF, CaF₂, др., нами продолжено использование данного лазерного метода для нанесения ориентированным способом УНТ на поверхность полупроводниковых материалов ZnS и ZnSe. Выполнены как экспериментальные исследования, так и проведено квантово-химическое моделирование с использованием методов и подходов группы квантовых химиков из Троицка (Д.Г.Квашнин и др.). Схем-но картину «разлета» УНТ при таком подходе можно понять при просмотре ниже (слева).

Глубина проникновения УНТ в приповерхностные слои полупроводника представлена на рис.(справа).

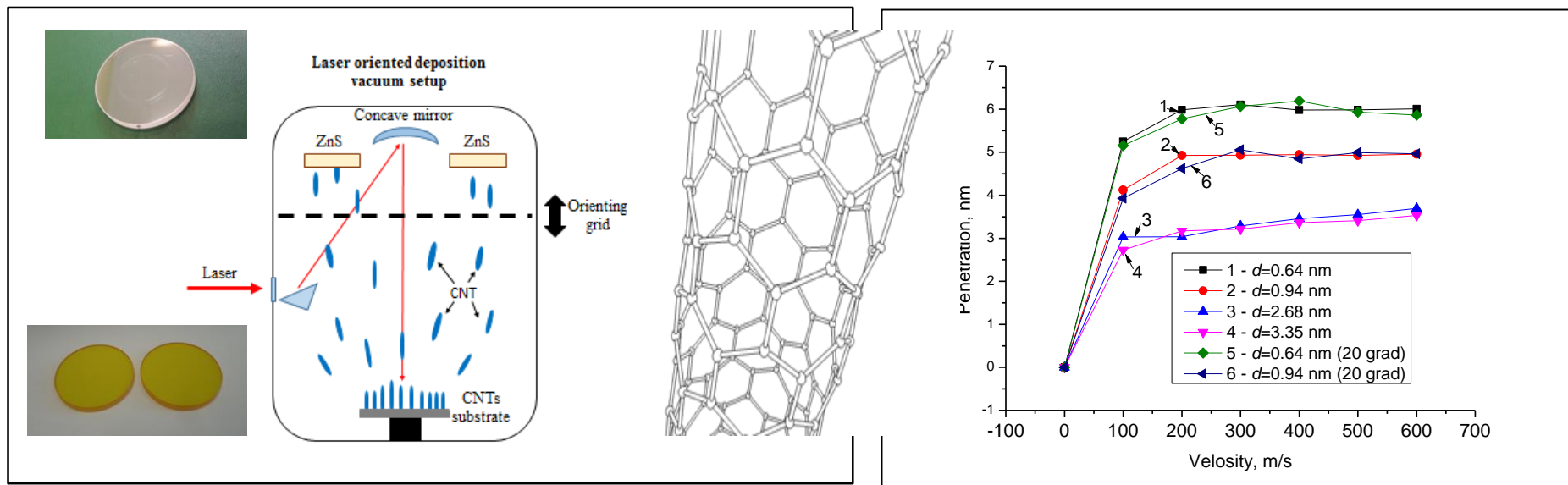


Таблица. Сравнительные данные по микротвёрдости для чистых и наноструктурированных образцов ZnSe. (нагрузка 20 г)

Исследуемая система/ число измерений	Микротвёрдость, Па×10 ⁹											Сред. значение	Коэф-фициент увеличения микротвёрдости
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		
Чистая матричная структура	0.1037	0.1013	0.1143	0.1115	0.1101	0.1115	0.1249	0.1249	0.1062	0.1062	0.1157	0.1118	1.05 т.е. ~5%
Нано-обработанная структура	0.1157	0.1157	0.1143	0.1143	0.1157	0.1157	0.1317	0.1317	0.1088	0.1102	0.1187	0.1175	

В работе команды Н.В.Каманиной в 2021 г. выполнены все плановые показатели по исследованиям материалов, заявленные в тематической карточке по плану 2021 г.

Опубликованные статьи, *с превышением данного показателя в 3 раза*, представлены ниже:

1. Natalia Kamanina, Andrey Toikka and Irina Gladysheva, "ITO conducting coatings properties improvement via nanotechnology approach". Nano Express, **2021**, 2, 010006, 8 pages. <https://doi.org/10.1088/2632-959X/abd90c>
2. Н. В. Каманина, А. С. Тойкка, С. В. Лихоманова, Ю. А. Зубцова, Л. С. Ломова, П. В. Кужаков, "Корреляция между концентрацией вводимых наночастиц и рельефом поверхности органических матриц: перспективный способ ориентирования ЖК-молекул", Жидк. крист. и их практич. использ. **2021**. Том 21. Номер 1. Страницы 44—49. DOI: 10.18083/LCAppl.2021.1.44. http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/ru/articles/article.php?year=2021&issue=1&first_page=44
http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/articles/635830article_2021_21_1_44-49.pdf
3. А. С. Тойкка, Л. С. Ломова, Н. В. Каманина, «Влияние наночастиц WS₂ на рефрактивные свойства жидкокристаллических композиций», Оптический журнал, **2021**, Том 88, № 8, с.75-80.
DOI:10.17586/1023-5086-2021-88-08-75-80
4. Natalia Kamanina, Konstantin Borodianskiy, and Dmitry Kvashnin. "Surface Heterostructure of Aluminum with Carbon Nanotubes Obtained by Laser-Oriented Deposition", *Coatings*, **2021**, 11, 674, 7 pages. <https://doi.org/10.3390/coatings11060674>
5. Н. В. Каманина, А. С. Тойкка, Д. Г. Квашнин. "Жидкокристаллические системы с WS₂ наночастицами в эффекте ограничения оптического излучения", Жидк. крист. и их практич. использ. 2021. Том 21. Номер 2. Страницы 73—81. DOI: 10.18083/LCAppl.2021.2.73. http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/ru/articles/article.php?year=2021&issue=2&first_page=73.
http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/articles/233827article_2021_21_2_73-81.pdf
6. Н. В. Каманина, П. В. Кужаков, Д. Г. Квашнин. "Перспективные наноструктурированные покрытия для модификации поверхности фторида кальция", Оптический журнал, **2021**, Том 88, № 8, с.81-87. DOI:10.17586/1023-5086-2021-88-08-81-87
7. A. Toikka and N. Kamanina. "Laser-vacuum deposited ITO thin films for optoelectronic applications". *Technium Romanian Journal of Applied Sciences and Technology*, 3(7), 154–160 (2021) (<https://doi.org/10.47577/technium.v3i7.4594>)
8. Natalia Kamanina, "Study of the correlation between the content of nanoobjects and surface features", Proceed. of CBU International conference on innovations in science and education, Natural sciences and ICT ([Proceedings of CBU in Natural Sciences and ICT](#)), March 17, 2021, Vol.2, pp.47-51, PRAGUE, CZECH REPUBLIC, 2021, DOI: <https://doi.org/10.12955/pns.v2.1> <https://ojs.cbuic.cz/index.php/pns/article/view/152>.
WoS. <https://ojs.cbuic.cz/index.php/pns/article/view/152/559>. <https://doi.org/10.12955/pns.v2.152>
9. Natalia Kamanina, Andrey Toikka, Bulat Valeev and Dmitry Kvashnin, "Carbon Nanotubes Use for the Semiconductors ZnSe and ZnS Material Surface Modification via the Laser-Oriented Deposition Technique", C (MDPI), 2021, Vol.7, Iss.4, 10 pages. <https://doi.org/10.3390/c7040084>. <https://www.mdpi.com/2311-5629/7/4/84>
10. Н. В. Каманина, А. С. Тойкка, Г. Н. Зверева, П. В. Кужаков, Я. В. Барнаш, С. А. Тарасов. "Рельеф поверхности полиимидных тонкопленочных ориентирующих материалов для жидкокристаллических модуляторов света", Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2021. Т. 21, № 4. С. 47–52/Liquid Crystals and their Application. 2021. Vol. 21, №4. P.47–52. DOI: 10.18083/LCAppl.2021.4.47. http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/ru/articles/article.php?year=2021&issue=4&first_page=47



**Лаборатория химии и спектроскопии
углеродных материалов
Отделения перспективных разработок**

Проблема переработки отходов гальванических производств

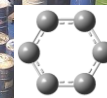
В производственном цикле большинства машиностроительных, приборостроительных и других предприятий применяются гальванические процессы, в результате которых образуется большой объем жидких токсичных отходов - сточных вод, отработанных электролитов и различных концентратов.

При переработке таких растворов образуются токсичные твердые отходы - гальванические шламы. В состав **гальванических шламов** входят соединения железа и кальция, а также токсичные соединения хрома, меди, свинца, кадмия, никеля, марганца.

Существующие технологии требуют применения **многостадийных процессов с использованием большого** числа разнообразных, **токсичных реагентов (химические методы)**^а, **либо большого расхода энергии** (электрохимические методы)^б производства и не могут быть применены при резких колебаниях химического состава шлама.

^а Селиванова Н. В. и др. Изв. Самар. науч. центра РАН. 2011. 13. 2085–2088.

^б Лавров Б. А. и др. Записки Горного института. 2005. 165. 110–111.



Решение

Разработана технологическая схема, позволяющая получать из отходов гальванических производств с высоким выходом смесевые водорастворимые металлуглеродные наноструктуры.

Установлено, что из гальванических шламов могут быть получены металлфталоцианины, пиролизаты фталоцианинов, смесевые эндометаллофуллерены и их гидроксिलированные производные, в состав которых входят все металлы исходного гальванического шлама.

Увеличение выхода пустотелых фуллеренов при использовании композитных электродов!

Схема переработки металлсодержащих гальванических шламов в металлоуглеродные структуры



Таблица 3

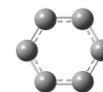
Параметры электродугового испарения и характеристики полученных продуктов испарения композитных электродов

Показатель	1	2	3	4	5	6	7	8
Ток дуги, А	180	150	150	180	200	180	180	180
Скорость эрозии электрода, г·мин ⁻¹	0.30	0.14	0.07	0.11	0.14	0.14	0.22	0.19
Выход сажи, мас%	66.0	32.0	52.0	48.0	57.0	45.1	38.1	38.0
Содержание фуллеренов в саже, мас%	13.5	0.2	9.0	7.8	4.8	9.7	7.2	7.0
Содержание металла,* мас%:	11.3	—	3.2	3.6	2.8	5.9	11.5	16.1
сажа депозит	0.9	—	0.3	0.2	0.5	0.5	0.3	0.3
Выход металлофуллеренового экстракта, мас%	37.8	—	31	23	30	27.0	16.5	19.7
Содержание металла* в металлофуллереновом экстракте, мас%	7.8	—	1.2	1.7	1.8	3.8	5.7	4.8
Продуктивный показатель, П _{Ме}	19460	—	1934	1877	3078	4630	3580	3590

* Электроды № 1, 3–6 — содержание Fe; электрод № 7 — суммарное содержание Cr, Fe, Ni, Cu, Zn; электрод № 8 — суммарное содержание Fe, Ni, Cu, Zn.

Данная схема предполагает использование **необезвоженных гальванических шламов, имеющих влажность 80–85%**, без специальной подготовки.

Sedov, V. P., Borisenkova, A. A., Fomin, S. V., Suyasova, M. V., Orlova, D. N., Fokin, N. S., & Krivorotov, A. S. (2021). Processing of Metal-Containing Electroplating Slimes into Mixed Water-Soluble Metal–Carbon Structures. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 94(5), 560-568.



Исследование процесса тушения пламени жидких углеводородов водными суспензиями воды с астраленами (совместно с СПУГПС МЧС)

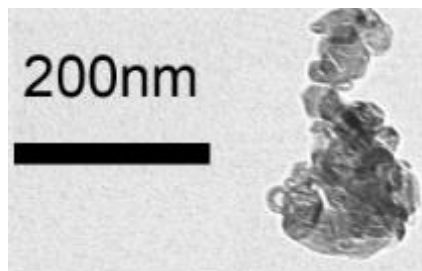
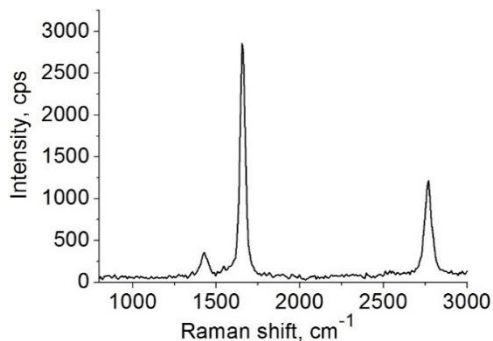


Fig. 1. Рамановский спектр астраленов (a) и SEM-изображение (b).

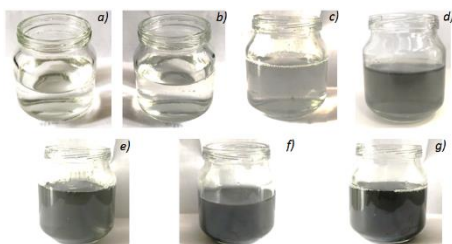


Fig. 2. Photo DW (a), suspensions at the content of 0.05 vol.% (b), 0.2 vol.% (c), 0.5 vol.% (d), 1.0 vol.% (e), 1.2 vol.% (f); 1.5 vol. % (g) astralenes

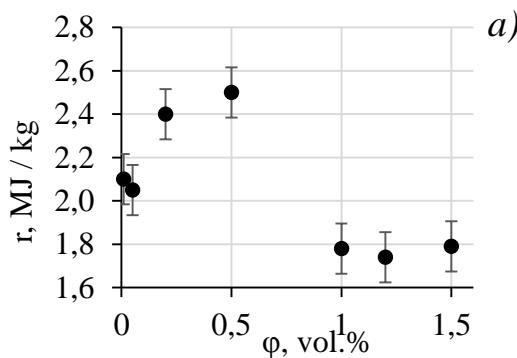


Fig. 4. Зависимости удельной теплоты парообразования от концентрации астраленов

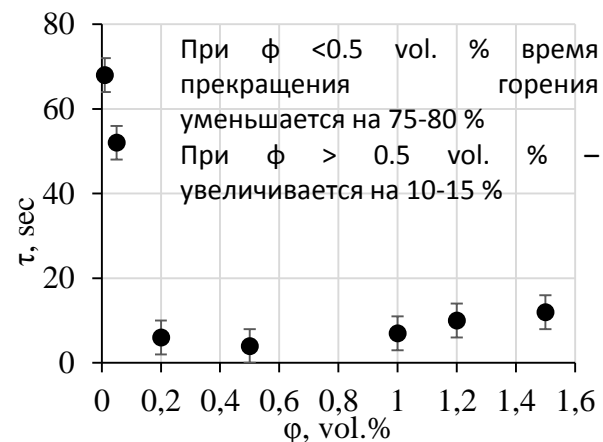


Fig. 3. Зависимость времени тушения жидких углеводородов от концентрации астраленов.



Время прекращения горения жидких углеводородов при подаче огнетушащего состава с астраленами является следствием интенсификации процессов теплопереноса в конвекционной зоне горения при испарении наножидкости. Это объясняется увеличением значений удельной теплоты парообразования наножидкости. Увеличение температуры горячей жидкости при $\phi > 0.2$ vol. % свидетельствует о том, что большая часть огнетушащего состава испаряется в конвекционной зоне горения. Обсуждается механизм действия составов с астраленами

Инновационная продукция ЛХСУМ

№ п/п	Наименование продукта	Степень чистоты	Способ изготовления
1	C_{60}	осч	Защищен патентом РФ № 2456233, 2010 г.
2	C_{70}	осч	Защищен патентом РФ № 2455230, 2010 г.
3	$C_{120}O$	95%	Защищен патентом РФ № 2626635, 2016 г.
4	Высшие фуллерены (C_{76} , C_{78} , C_{82-84} и др.)	$\geq 95\%$	Препаративная жидкостная хроматография
5	$C_{60}(OH)_{30}$	осч	Защищены патентом на РФ № 2558121
6	$C_{70}(OH)_{32}$	осч	
7	Высшие фуллеренолы	$\geq 95\%$	
8	$C_{120}O(OH)_x$	95%	
9	Эндоэдральные фуллеренолы $Me@C_{2n}(OH)_{38-40}$ Me = Gd, Tb, Pr, Sc, Ho, Dy, Sm, Tm, Eu, Fe, Ni, Co, Mn, Mo	50-95%	Защищены патентами РФ изобретение №2659972, №2664133
10	Экзо-комплексы C_{60} , C_{70} с биосовместимыми полимерами (поливинилпирролидон, декстрин и др.)	$\geq 95\%$	Разработана лабораторная процедура
11	Экзо-комплексы эндоэдральных фуллеренов и с биосовместимыми полимерами (поливинилпирролидон, декстрин и др.)	50-95%	Разработана лабораторная процедура
12	Экзо-комплексы эндоэдральных фуллеренов и с биосовместимыми полимерами (поливинилпирролидон, декстрин и др.) и витаминами	50-95%	Разработана лабораторная процедура
13	Меченные эндоэдральные фуллерены $Me@C_{2n}(OH)_{38-40}$ Me = Gd, Tb, Pr, Sc, Ho, Dy, Sm, Tm, Eu, Fe, Ni, Co, Mn, Mo	50-95%	Защищены патентами РФ изобретение №2659972, №2664133 + протонное или нейтронное облучение



Внутреннее сотрудничество

1. Исследование кристаллической структуры фуллеренов (совместно с ОНИ)

Nigmatullina, E. K., Kibalin, I. A., **Sedov, V. P., Borisenkova, A. A.**, Bykov, A. A., & Golosovsky, I. V. (2021). 'Phantom'atoms and thermal motion in fullerene C60 revealed by x-ray and neutron diffraction. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **33(45)**, 455401.

1. Исследование антиоксидантной активности и токсичности фуллеренов (совместно с ОМРБ)
2. Исследование магнитных свойств продуктов электродугового испарения (совместно с ОФВЭ)
3. Теоретическое исследование новых эндо-комплексов и механизмов их стабилизации и выделения (совместно с ЛКХ ОПР)

Внешнее сотрудничество

1. ФГБУН Ботанический институт им. В. Л. Комарова РАН (БИН РАН);
2. Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Агрофизический научно-исследовательский институт» (сокращенное наименование – ФГБНУ АФИ), сотрудничество по вопросам научно-исследовательской, инновационной и просветительской деятельности в области разработки удобрений на основе древесной золы с добавлением различных микроэлементов и фуллеренов для сельскохозяйственных культур, обеспечивающих продовольственную безопасность страны в условиях изменения климата.
3. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» (НИТУ «МИСиС»), термоэлектрики на основе фуллеренов, полимеров и квантовых точек.
4. Институт физики макроструктур РАН, проведение научно-исследовательских работ в области технологии тонких пленок, молекулярной электроники, гибридных фотовольтаических устройств на основе фуллеренов и фталоцианинов.
5. ФГБОУ ВО "Санкт-Петербургский университет Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий, проведение научно-исследовательских работ в области пожаротушения жидких углеводородов водными суспензиями с углеродными добавками.

Лаборатория голографических, информационных и измерительных систем (ЛГИИС)

I. Продолжение модернизации автоматического голографического интерферометра для синтеза линейных голографических дифракционных решеток (ЛГДР).

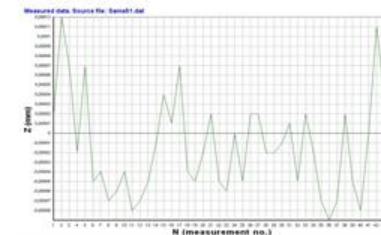
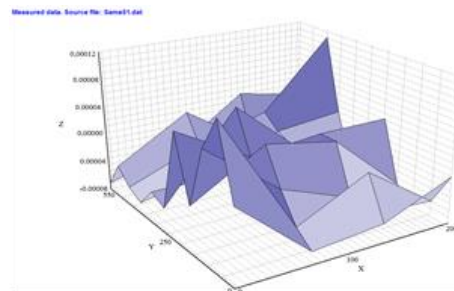
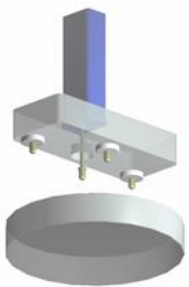
Отладка новой электронной системы управления устройством синтеза *линейных голографических дифракционных решеток* с частотой 1000лин/мм.

II. Продолжение модернизация автоматического голографического интерферометра для синтеза РГДР.

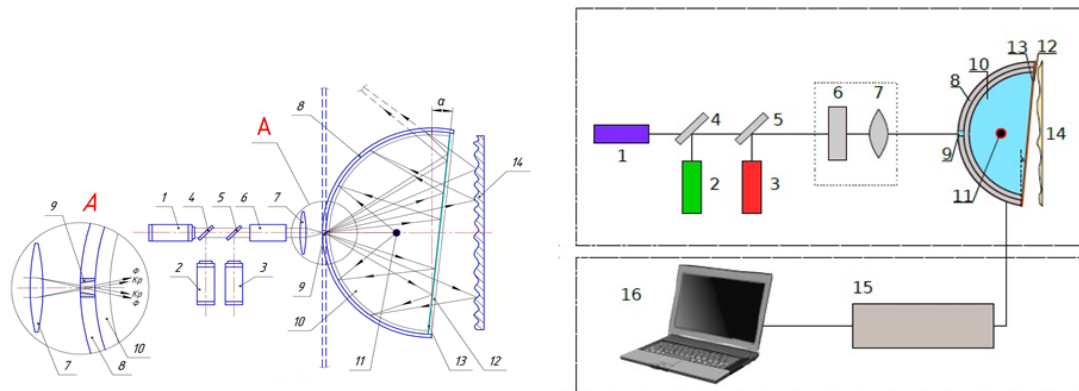
Отладка новой электронной системы управления синтезом радиальных решеток с частотой 162 000штр./2π.

III. Проведены работы по изучению погрешности при помощи портативного нано-голографического плоскомера:

- Плоскостности габбро-диабазовой плиты направляющей каретки интерферометра установки синтеза линейных метрологических ЛГДР (МЛГДР);
- погрешности формы радиальных голографических дисков МРГДР, таких как клиновидность и неплоскостность поверхности.



IV. Предложены малогабаритные высокоразрешающие цифровые голографические микроскопы для прозрачных и отражающих объектов, которые могут быть использованы при исследованиях на озере ВОСТОК.



V. Исследованы элементы топологии углоизмерительной структуры радиального голографического диска с помощью оптико-электронной системы считывания информации.

Была изучена предельная возможность разрешающей способности оптической системы и дана численная оценка главным составляющим погрешностям оптической системы считывания, определены основные параметры ее узлов

VI. Созданы малогабаритные голографические преобразователи линейных перемещений ДЛП-720, ДЛП1-550, ДЛП2-550

для применения на станках компании «СТАН»



Основные результаты исследований и разработок ЛГИИС в 2021 г.

- 1. Портативный наноголографический плоскомер.** Б.Г.Турухано, Н.Турухано, С.Н. Ханов, Ю. М. Лавров, В.В.Добырин, О.Г. Ермоленко, Л.А. Константинов, Е.А. Вилков, И.В. Ладатко. НАНОИНДУСТРИЯ, т. 14, № 3-4, 212-223 (2021).
- 2. Высокоразрешающий. цифровой голографический микроскоп для прозрачных объектов.** Турухано Б.Г., Турухано И.А., Турухано Н. НАНОИНДУСТРИЯ, т. 14, № 3-4, 232-240 (2021).
- 3. Запись голографических дифракционных решеток с помощью импульсного лазера.** Турухано Б.Г., Турухано Н., Турухано И.А. НАНОИНДУСТРИЯ, т. 14, № 5, 312-320 (2021).
- 4. Считывание информации с оптического диска.** Турухано Б.Г., Турухано Н., Лавров Ю.М., Ханов С.Н., Ладатко И.В., Константинов Д.Л., Ермоленко О.Г., Вилков Е.А. Препринт ПИЯФ, № 3057, 2021. (ISBN 978-5-86763-459-9).
- 5. Голографическая память.** Турухано Б.Г., Турухано И.А., Турухано Н. ПРИБОРЫ И СИСТЕМЫ. УПРАВЛЕНИЕ, КОНТРОЛЬ, ДИАГНОСТИКА. № 2, 22-32 (2021).
- 6. Высокоразрешающий цифровой голографический микроскоп для отражающих объектов.** Турухано Б.Г., Турухано И.А., Турухано Н.Ж. ПРИБОРЫ И СИСТЕМЫ. УПРАВЛЕНИЕ, КОНТРОЛЬ, ДИАГНОСТИКА, № 3, 10-15 (2021).

ОИТА ЛИВС: для TDAQ ATLAS (WebRC)

Продолжено развитие веб-приложения WebRC (Web-based Run Control), позволяющего полностью контролировать сессию сбора данных ATLAS (run) напрямую из браузера Firefox из любой точки, без необходимости входа через шлюз и запуска приложений из внутренней сети.

В дерево детекторов интегрированы данные о busy-мониторинге детекторов, и добавлена возможность конфигурирования показа пользоват. панелей мониторинга (Grafana dashboards).

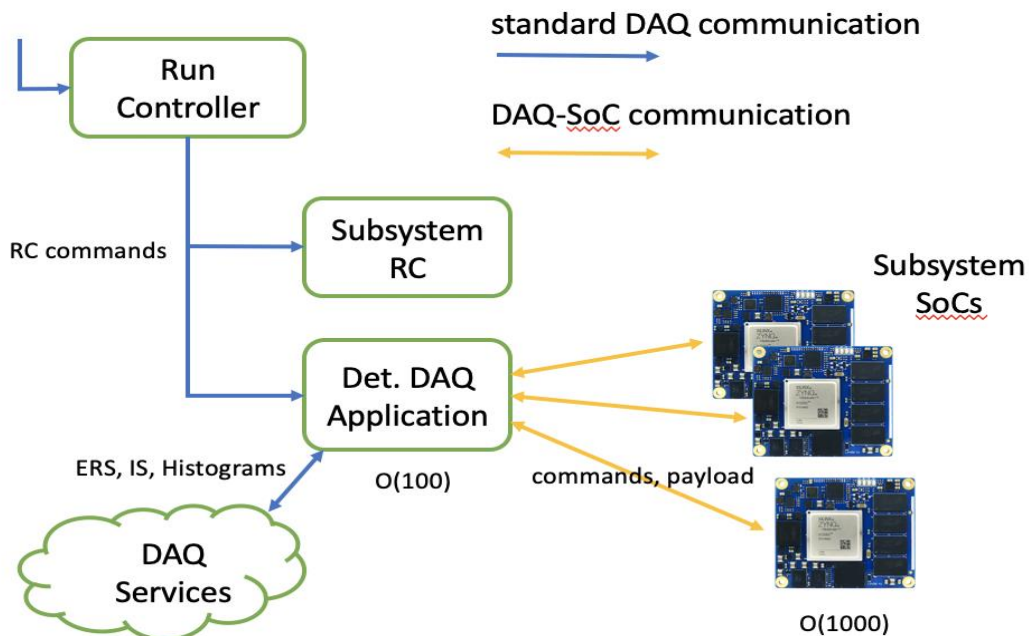
Time	Severity	Component	Message
30/09 11:51:03	WARNING	ROS-TIL-LBA-01	ROS::ROSRobinNPEExceptions : RobinNP::clearRequest: The RobinNP could not delete 1 events because they were not in its buffer. The first failed delete was for L1ID = 0x2f0437a9 for Rol 6 Most Recent ID = 0x2f0464a0 Pre Delete suppressed, last occurrence was at 2021-Sep-30 11:50:25,529849
30/09 11:51:03	WARNING	ROS-TIL-LBA-01	ROS::ROSRobinNPEExceptions Fragment error: RobinNP::processIncomingFragment: Rol 6 Fragment marked with TX error(s). L1ID = 0x2f043769 for RobinNP 0. Error description: Fragment L1ID out of sequence; - no fragment dump occurrence was at 2021-Sep-30 11:50:25,391380
30/09 11:51:03	WARNING	ROS-TIL-LBA-01	ROS::ROSRobinNPEExceptions Fragment error: RobinNP::processIncomingFragment: Rol 6 Fragment marked with TX error(s). L1ID = 0x2f043769 for RobinNP 0. Error description: Fragment L1ID out of sequence; - no fragment dump occurrence was at 2021-Sep-30 11:50:25,391380
30/09 11:51:03	WARNING	ROS-TIL-LBA-01	ROS::ROSRobinNPEExceptions Duplicate fragment: RobinNP::processIncomingFragment: Fragment for L1ID 0x2f043769 already exists in index for Rol 0x6 replacing with newer version for RobinNP 0 -- 0 similar messages suppressed,
30/09 11:51:03	WARNING	ROS-TIL-LBA-01	ROS::ROSRobinNPEExceptions Fragment error: RobinNP::processIncomingFragment: Rol 6 Fragment out of sequence: L1 ID = 0x2f043769, Most Recent ID 0x2f0437a8 for RobinNP 0 -- 0 similar messages suppressed, last occurrence
30/09 11:51:03	WARNING	ROS-TIL-LBA-01	ROS::ROSRobinNPEExceptions Fragment error: RobinNP::processIncomingFragment: Rol 6 Fragment out of sequence: L1 ID = 0x2f043769, Most Recent ID 0x2f0437a8 for RobinNP 0 -- 1 similar messages suppressed, last occurrence
30/09 11:50:55	ERROR	TileEBC_RODRCD TileRCD::Issue	It seems that 8 drawers are off, namely EBC53 EBC55 EBC54 EBC56 EBC57 EBC58 EBC59 EBC58 EBC60. This is probably a big problem. Call IMMEDIATELY Tile Run Coordinator (16-3155) and DCS expert (16-34

WebRC широко использовалось в ходе Milestone Weeks 2021

ОИТА ЛИВС: для TDAQ ATLAS (DAQ-SoC)

Завершено создание прототипа программного пакета **daq2soc**, который будет применяться для интеграции детекторных систем, основанных на System-on-Chip (SoC), в систему управления Run Control TDAQ.

Предложенное решение не зависит от п/о TDAQ, что было одним из основных требований к дизайну системы, и обеспечивает широкие возможности применения для различных приложений.



Предложенная в прототипе версия основана на протоколе HTTP и в качестве реализации на стороне сервера выбран пользовательский модуль подгружаемый как расширение в сервер nginx, тогда как на стороне клиента использована библиотека **beast** из пакета **Boost**.

Работоспособность серверной части проверяется на виртуальной машине с Linux CentOS Stream 8 с архитектурой **aarch64**, выполняемой в эмуляторе **qemu**.

Лаборатория квантовой химии

<http://qchem.pnpi.spb.ru>

Лидеры (руководители) направлений исследований ЛКХ:

Н.С. Мосягин (зам.зав.лаб., снс, кфмн)

А.Н. Петров (внс/доц.СПбГУ, дфмн +кхн)

А.В. Зайцевский (знс МГУ/внс, дфмн)

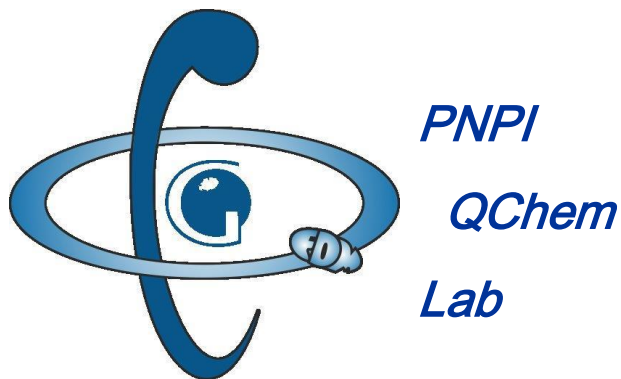
О.Ю. Андреев (проф.СПбГУ /внс, дфмн)

Л.В.Скрипников (снс /доц.СПбГУ, кфмн)

С.Г. Семенов (снс, кхн)

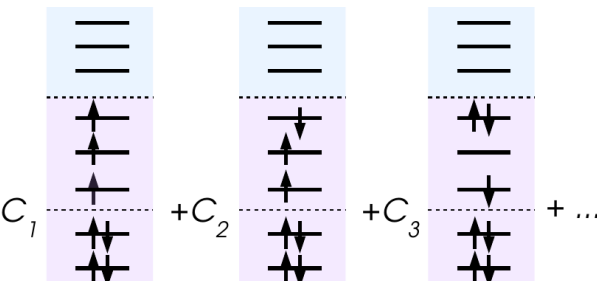
Т.А. Исаев (снс, кфмн)

А.В. Титов (и.о.зав.лаб., дфмн)



Релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока: три электрона над замкнутой оболочкой

электронные волновые функции типа



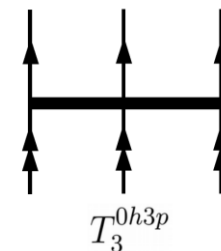
детерминанты с тремя электронами над замкнутой оболочкой

первая релятивистская реализация: пакет EXP-T (ЛКХ)

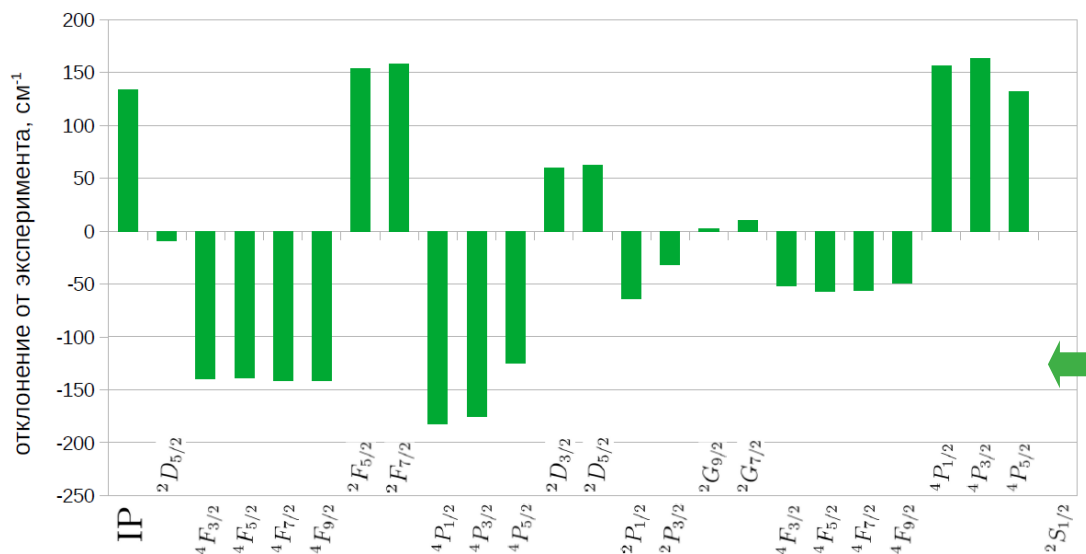
перспективы приложений к объектам, ранее недоступным для прецизионного моделирования:

- ✓ состояния атомов и ионов лантаноидов и актиноидов
- ✓ молекулы (и кластерные модели твердых тел) соединений актиноидов

включение трехкратных возбуждений в кластерный оператор необходимо



электронные переходы в нейтральном атоме лантана (La I)



- плотный спектр
- выраженные релятивистские эффекты

погрешность расчетных энергий возбуждений менее 200 см⁻¹: беспрецедентная точность для подобных объектов

Релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока: приложения

релятивистское моделирование и интерпретация электронно-колебательных спектров молекул

RaCl

возможность прямого лазерного охлаждения

KCs

поиск схем лазерной сборки из ультрахолодных атомов

CO

интенсивности “запрещенных” переходов для астрофизических приложений

✓ **погрешность** оценок энергий возбуждений **меньше колебательного кванта**
критически важно для анализа эксп. спектров
✓ **точность** расчета вероятностей переходов не хуже экспериментальной (измерения доступны для малой части переходов)

расчет сверхтонкой структуры уровней атомов и молекул

KCs

анализ зависимости сверхтонких расщеплений линий от колебательных квантовых чисел

Bi

уточнение характеристик ядра

✓ объекты были недоступны для точного моделирования до разработок вариантов метода связанных кластеров в пространстве Фока в ЛКХ

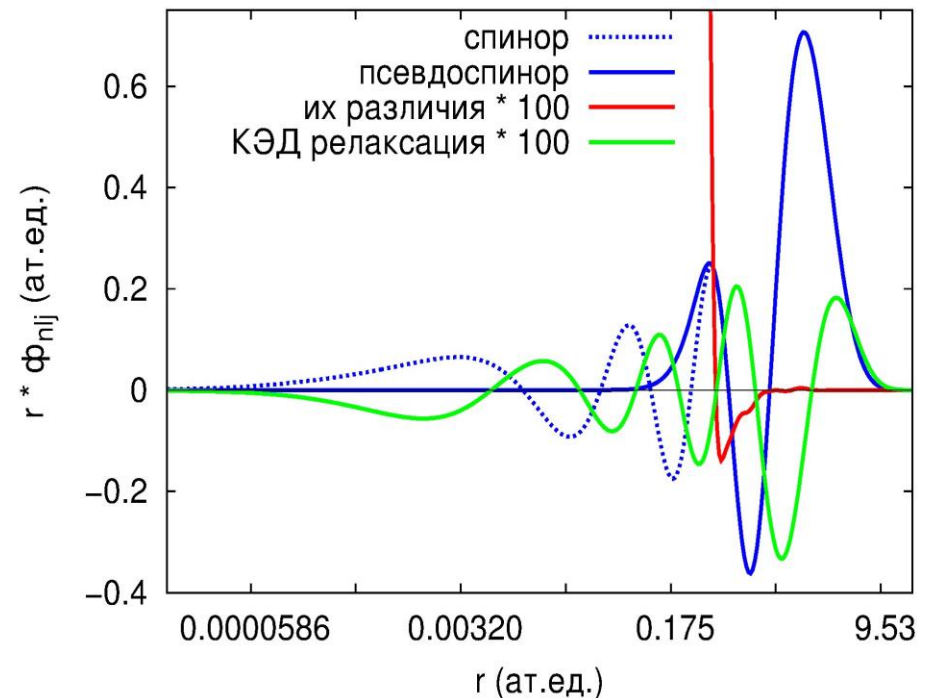
Учет квантовоэлектродинамических эффектов в модели обобщенных релятивистских псевдопотенциалов.



Радиальные части $7s_{1/2}$ псевдоспинора и спинора из расчета атома Rg с конфигурацией $6d^{10} 7s^1$.

Расчеты атома Rg (e111, eka-Au) методом Хартри-Фока (см⁻¹).

Релят. конф.	ДКБ+ КЭД	Вкл ад КЭ Д	Абс. погр. ОРПП	Абс. погр. Вал. ОРПП
$6d_{3/2}^4 6d_{5/2}^5 7s_{1/2}^2$ →				
$6d_{3/2}^3 6d_{5/2}^6 7s_{1/2}^2$	18897	-92	11	65
$6d_{3/2}^4 6d_{5/2}^6 7s_{1/2}^1$	21196	543	-29	17
$6d_{3/2}^4 6d_{5/2}^4$ $7s_{1/2}^2 7p_{1/2}^1$	22975	-186	25	-9



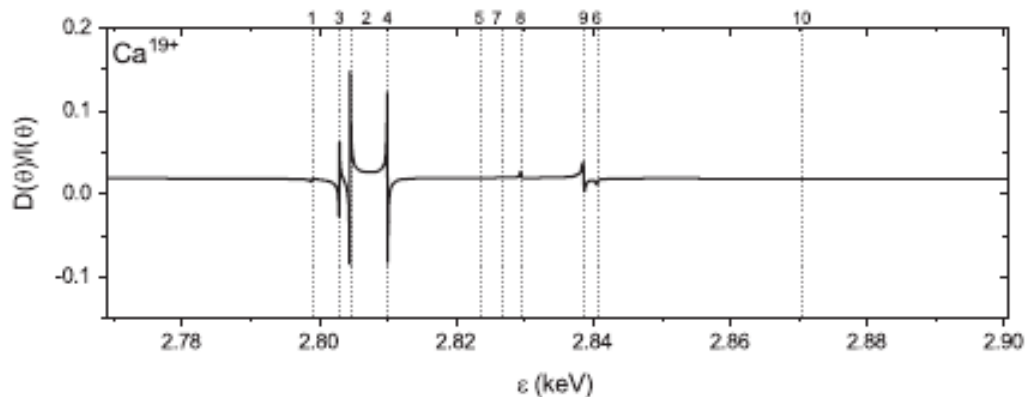
Н.С.Мосягин, И.И.Тупицын, В.А.Ерохин, А.В.Титов, А.В.Зайцевский, “Учет квантовоэлектродинамических эффектов в модели обобщенных релятивистских псевдопотенциалов”, XXXIII Симпозиум “Современная химическая физика” (Туапсе, 24 сентября - 04 октября 2021 года), устный доклад.

В.М. Шахова, Н.С. Мосягин, А.В. Титов, “Псевдопотенциалы, модельные и эффективные потенциалы атомных остовов: история развития”, подготавливается для публикации.

Разработан метод для описания резонансного рассеяния электронов на многозарядных ионах строго в рамках КЭД: впервые произведено исследование полного набора параметров для возможных изменений поляризации электронов

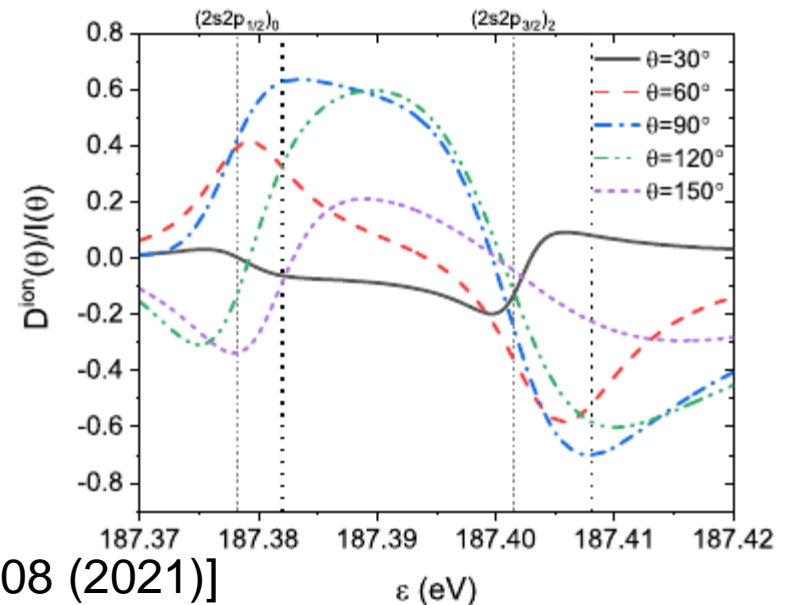
Изменение поляризации электронов в процессе рассеяния полностью описывается пятью параметрами (D, F, G, H, K).

Рассмотрен резонансный канал рассеяния электронов на H-подобных ионах с образованием автоионизационных состояний (2s2s), (2s2p), (2p2p). Вклады этих состояний значительно усиливают изменение поляризации рассеянных электронов.



Знание параметров изменения поляризации необходимо для описания изменения Поляризации как рассеянных электронов, так и для рассеивающих ионов.

На рисунках показано изменение поляризации Электрона (слева) и H-like иона Be (справа) в зависимости от энергии налетающего электрона. Хорошо видна зависимость поляризации от энергии электрона.



Впервые произведён КЭД расчёт вероятностей ТЕОР (two-electron one-photon) переходов в He-подобных ионах

ЛКХ

ТЕОР переходы представляют сейчас значительный интерес для теории и

эксперимента поскольку они происходят за счёт особого механизма: оба электрона Меняют свои (главные) квантовые числа, но с вылетом только одного фотона.

Например,
 $(2s2p) \rightarrow (1s1s)$.

Сложность расчёта таких переходов заключается в том, что начальное состояние является автоионизационным и лежит в континууме.

Для учёта промежуточных состояний

Непрерывного спектра, близких и

Равных по энергии к начальному состоянию,

Разработан и применён особый метод тонкой

Подстройкой радиуса сферы, заключающей

Многозарядный ион.

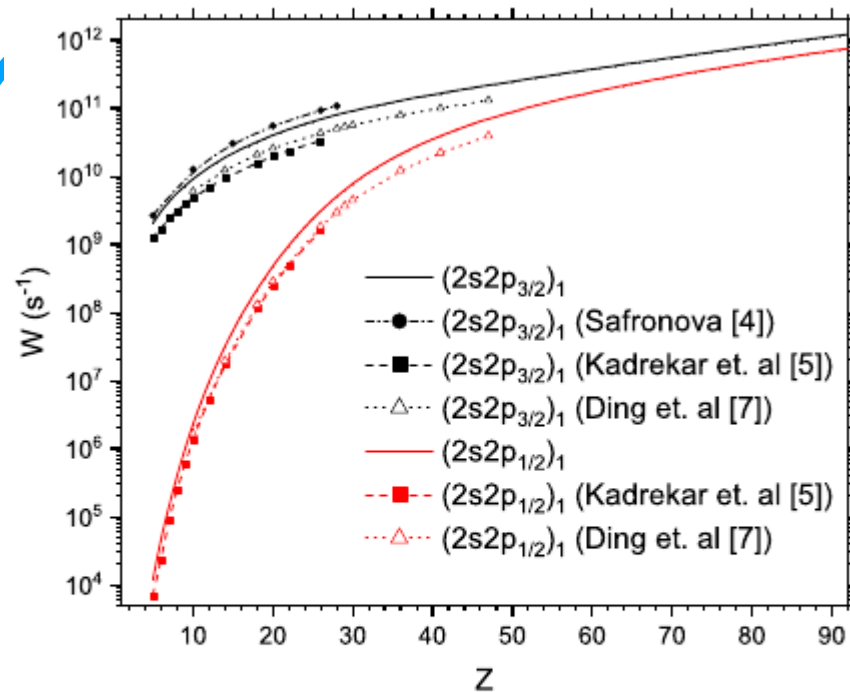
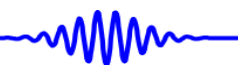


FIG. 2. Transition probabilities (W) as functions of Z for $(2s2p_{3/2})_1 \ ^1P_1 \rightarrow (1s)^2 \ ^1S_0$ (black curves) and $(2s2p_{1/2})_1 \ ^3P_1 \rightarrow (1s)^2 \ ^1S_0$ (red curves) transitions. The results of [5,7] are presented in the length gauge; the results of [4] are presented in the dipole approximation. The difference between our results obtained in different gauges is barely noticeable in the scale of this plot.

Курчавов И.П., Петров А.Н., Расчет $^{179}\text{HfF}^+$ для поиска эффектов нарушения пространственной четности и временной инвариантности, Оптика и спектроскопия 129, 825 (2021)

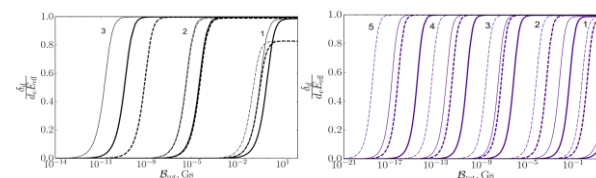


- Ядерный магнитный квадрупольный момент (МКМ) является низшим T, P-нечетным магнитным моментом. Измерение МКМ позволяет установить ограничения на T, P-нечетные ядерные силы, ЭДМ нейтронов, вакуумный угол КХД θ , хромо-ЭДМ кварков. Связанные с ЭДМ и МКМ расщепления для $^{179}\text{HfF}^+$
- Нами рассчитаны уровни энергий и g-факторы как функции статического электрического поля, энергии взаимодействия с электронным ЭДМ и МКМ ядер $^{177,179}\text{Hf}$ как функции вращающихся электрического и магнитного полей для различных компонент сверхтонкой структуры для основного вращательного уровня $J = 1$ электронного состояния $^3\Delta_1$ $^{177,179}\text{HfF}^+$
- Наши расчеты позволяют выбрать подходящие уровни для эксперимента, различить эффекты электронного ЭДМ и МКМ, извлечь их значения из расщеплений, измеренных в эксперименте, и оценить систематику, связанную с магнитным полем.

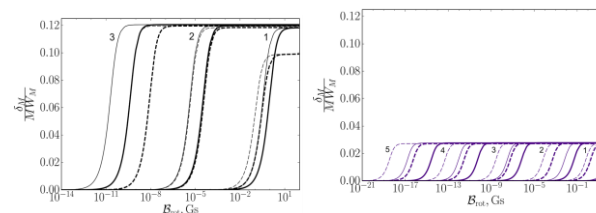
F=3 F₁=7/2

F=5 F₁=11/2

EDM:



MQM:



YbOH

Потенциальная поверхность молекулы YbOH построена **с учетом релятивистских эффектов и спин-орбитального взаимодействия**. Рассчитаны значения параметров P, T-нечетных взаимодействий E_s и E_{eff} с учетом усреднения по колебательно-вращательной волновой функции

Значение I-удвоения было найдено: **YbOH: $\Delta E=26$ MHz [J. Chem. Phys. 155, 164301 (2021)]**

Разница энергий уровней с противоположным значением проекции полного углового момента на лабораторную ось z:

$$E_{+M} - E_{-M} \simeq P(2E_{\text{eff}}d_e + 2E_s k_s),$$

P – коэффициент, который отражает степень поляризации молекулы. d_e – значение eEDM, k_s – константа связи для скалярно-псевдоскалярного электрон-ядерного взаимодействия.

Если известны параметры усиления E_{eff} и E_s , тогда можно извлечь значения d_e и k_s из этого расщепления энергии.

Sensitivities to the \mathcal{P} , \mathcal{T} -odd effects for YbOH

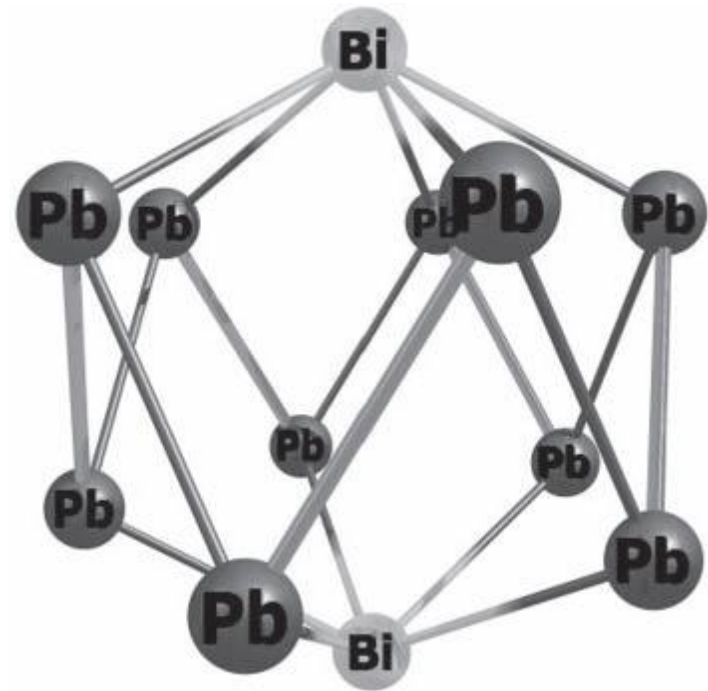
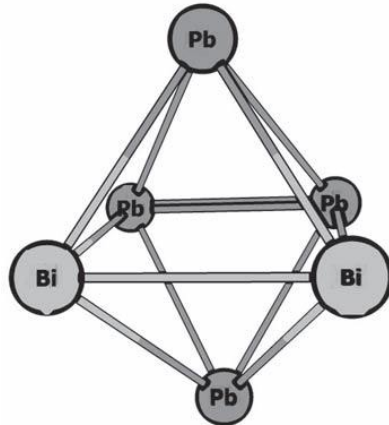
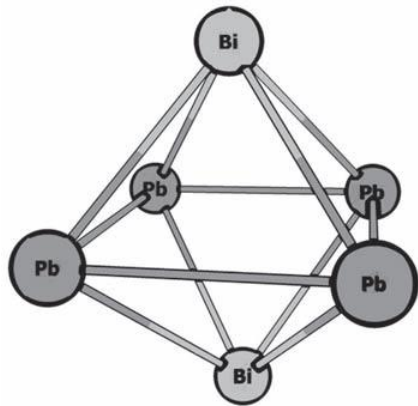
	E_{eff} , GV/cm	E_s , kHz
Equilibrium geometry	23.875	20.659
$v = 0$ state	23.810	20.602
$v = 1$ state	23.740	20.540
FSCC+Gaunt [Denis et al.(2019)]	23.37	
QZ CCSD [Prasanna et al.(2020)]	23.80	
cGHF [Gaul, Berger (2020)]	23.57	20.60
cGKS ^a [Gaul, Berger (2020)]	17.48	15.25

^a For the value of $\Omega = 0.495$.

МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ

Семенов С.Г., Бедрина М.Е., Клемешев В.А., Титов А.В. ЖОХ, 2021, 91(2), 290-300.

Semenov S.G., Bedrina M.E. Klemeshev V.A., Titov A.V.
Russ. J. Gen. Chem., 2021, 91(2), 241-250.



Решена проблема противоречия квадрупольных моментов $Q(^{209}\text{Bi})$, извлекаемых из атомных и молекулярных данных по электрической сверхтонкой константе B

$$Q = B(\text{эксперимент}) / EFG(\text{теория})$$

$\text{Bi}: 6s^2 6p^3$ – очень сложная конфигурация для теории

$Q(^{209}\text{Bi})$ из атомных и молекулярных данных:

“Атомное значение” для ^{209}Bi , MCDF: $Q = -516(15) \text{ mb}$ [Phys. Rev. Lett. **87**, 133003 (2001)]

“Молекулярное значение” для ^{209}BiN , CCSD(T) $Q = -420(8) \text{ mb}$ [Phys. Rev. A **88**, 052504 (2013); and others]

Противоречие???

Новый метод для конф. np^1, np^2, np^3 и др.

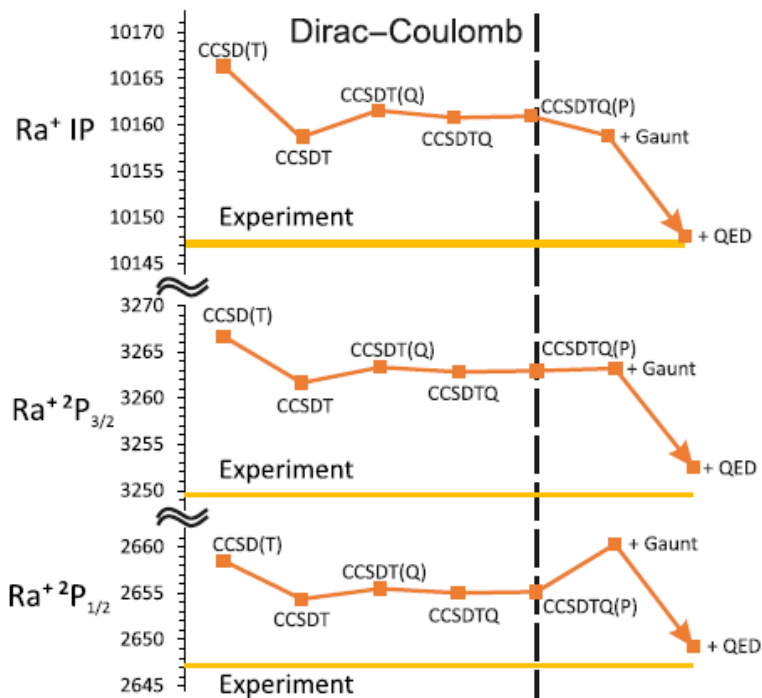
Наше новое атомное значение: $Q = B(^{209}\text{Bi } ^4S_{3/2}) / EFG(\text{теория, FS-CCSDT}) = -418(6) \text{ mb}$

✓ Теперь “атомное значение” Q согласуется с “молекулярным”

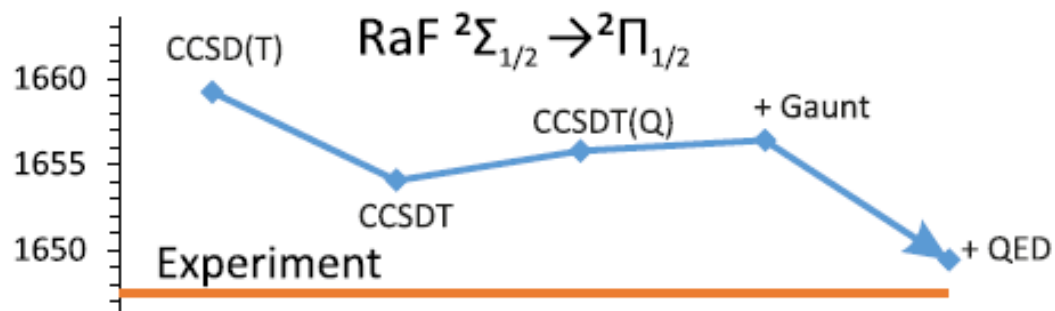
L.V. Skripnikov, A.V. Oleynichenko, A.V. Zaitsevskii, D.E. Maison, A.E. Barzakh, Phys. Rev. C **104**, 034316 (2021).

Эффективный оператор КЭД в четырёхкомпонентных расчётах малоатомных систем

единицы: $\text{meV} \sim 8 \text{ cm}^{-1}$



мы ввели эффективный оператор КЭД, который удобно использовать в четырёхкомпонентных расчётах молекул



- ✓ Использование этого оператора и наших методов построения базиса позволило впервые достичь уровня погрешности в несколько meV для нескольких состояний Ra^+ и RaF
- ✓ Погрешность энергий переходов в среднем в 10 раз меньше, чем во всех предыдущих расчётах



ПРАВИТЕЛЬСТВЕННАЯ ТЕЛЕГРАММА

МОСКВА 265/3/4101 84 10/2 1820=

ПРАВИТЕЛЬСТВЕННАЯ ГАТЧИНА ЛЕНИНГРАДСКОЙ ОРЛОВА РОЩА 1 НИЦ
КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ ПИЯФ СТАРШЕМУ НАУЧНОМУ СОТРУДНИКУ
СКРИПНИКОВУ Л В=

УВАЖАЕМЫЙ ЛЕОНИД ВЛАДИМИРОВИЧ
ПРИМИТЕ МОИ ПОЗДРАВЛЕНИЯ В СВЯЗИ С ПРИСУЖДЕНИЕМ ВАМ ПРЕМИИ
ПРЕЗИДЕНТА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ В ОБЛАСТИ НАУКИ И ИННОВАЦИОННОЙ

ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ ЗА 2021 ГОД И ПРИСВОЕНИЕМ ПОЧЕТНОГО ЗВАНИЯ
ЛАУРЕАТА ПРЕМИИ ПРЕЗИДЕНТА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ В ОБЛАСТИ НАУКИ И

ИННОВАЦИЙ ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

ЖЕЛАЮ ВАМ НОВЫХ НАУЧНЫХ ОТКРЫТИЙ И ДОСТИЖЕНИЙ НА БЛАГО РОССИИ

КРЕПКОГО ЗДОРОВЬЯ И ВСЕГО САМОГО ДОБРОГО=РУКОВОДИТЕЛЬ ФРАКЦИИ

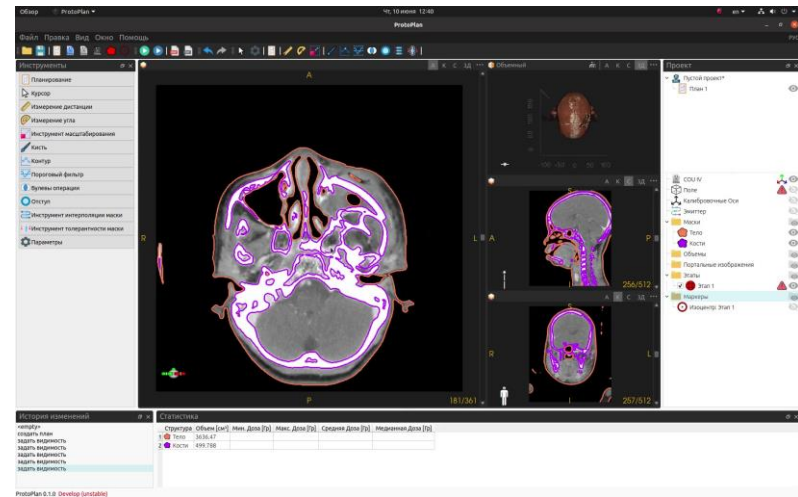
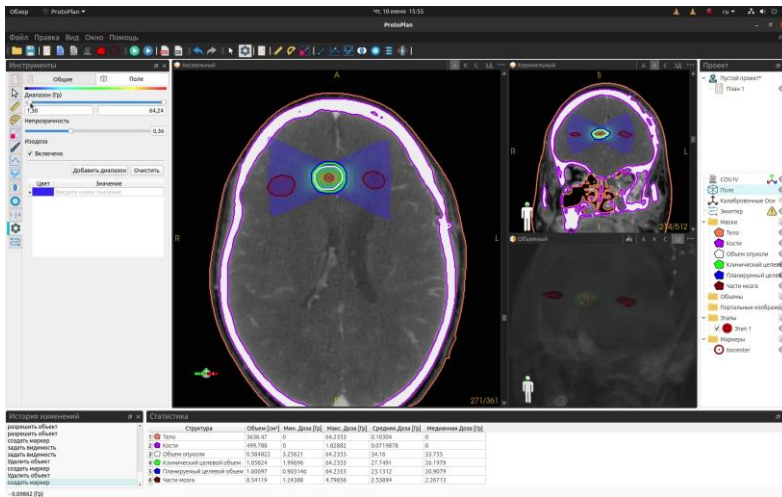
„СПРАВЕДЛИВАЯ РОССИЯ-ПАТРИОТЫ-ЗА ПРАВДУ“ С М МИРОНОВ-





Лаборатория медицинской физики

- Внедрено в работу ПО: Система планирования протонной терапии «ProtoPlan»



- Регистрация медицинского изделия:

1. Подано регистрационное досье в Росздравнадзор - документы за исходящей датой от 30.12.2021 зарегистрированы в АИС Росздравнадзора под № 97402 от 30.12.2021. Ожидается разрешение на клинические испытания.



Публикации лаборатории медицинской физики 2021

1. **A. Khalikov, N. Mamedova, F. Pak.** Dose Planning System for the Proton Beam Therapy Complex // 9th International Conference on Radiation in Various Fields of Research: Book of Abstracts, Montenegro, June 14-18. – 2021. – P. 275.
2. **N. Kuzora, A. Khalikov, N. Mamedova, Dj. Karlin.** Proton Beam Therapy Complex at 1000 MeV Proton beam // 9th International Conference on Radiation in Various Fields of Research: Book of Abstracts, Montenegro, June 14-18. – 2021. – P. 276.
3. **А.И. Халиков, Н.И. Мамедова, Р.Г. Бурковский, Ф.А. Пак, Л.Г. Ваганян, И.В. Василевская.** Система планирования лучевой терапии на пучке протонов 1000 МэВ // Материалы II Международной научно-практической конференции «Фундаментальная наука для практической медицины», Нальчик, 15-18 сентября. – 2021. – С. 44.
4. **Н.А. Кузора.** Proton Beam Therapy Complex at 1000 MeV // II Международная научно-практическая конференция «Фундаментальная наука для практической медицины», Нальчик, 15-18 сентября 2021. Стендовый доклад, диплом I степени.
5. **Н.И. Мамедова, Ф.А. Пак.** Система дозиметрического планирования лучевой терапии на пучке протонов 1000 МэВ. VIII Всероссийский с международным участием Молодежный научный форум «OpenScience 2021», Гатчина, 17-19 ноября. – 2021. [В печати].

Публикации в коллаборации с другими лабораториями

1. **О.М. Kotb, D.S. Brozhik, V.N. Verbenko, E.P. Gulevich, V.F. Ezhov, D.L. Karlin, F.A. Pak, A.M. Polyanchko, A.I. Khalikov, E.V. Chikhizhina.** Investigation of DNA Damage Induced by Proton and Gamma Radiation // **Biophysics.** – 2021. – Vol. 66. – №2. – pp. 202-208.
2. **A. Khalikov, D. Brozhik, O. Kotb, S. Paston, E. Gulevich, F. Pak, J. Karlin, V. Verbenko, V. Ezhov.** Influence of High-Energy Proton and Gamma-Radiation on DNA Structure in Solution // LXXI International conference «NUCLEUS-2021»: Book of Abstracts. – 2021. – P. 369.





Патенты и программы 2021

1. **Ф.А. Пак, Д.Л. Карлин, Н.А. Кузора, Н.И. Мамедова, В.И. Максимов, И.В. Василевская, Л.Г. Ваганян, А.И. Халиков, С.В. Таммсаар, В.А. Васильев.** Система планирования протонной лучевой терапии «Protoplan»// Свидетельство о государственной регистрации №2021680869

Практика и стажировка в ЛМФ

1. Проведены практические занятия и лекции школьникам 10-11 классов академической гимназии.





Основные результаты деятельности Ускорительного Отдела за 2021 г.

- На УК обеспечены исследования по направлениям: *Концептуальный*
 - радиационные испытания ЭКБ
 - медико-биологические
 - физические

В рамках проектов ПИЯФ «ИЗОТОП» и «ОКО»:

- Определено место положения в камере Ц-80 перезарядной фольги для выводной системы второго, работающего независимо от основного, пучка. Рассчитаны его начальные условия.
- Выбрано место для строительства здания.
- Выполнена разводка трактов транспортировки к мишенным станциям и в процедурную в соответствии с углами выходы пучков и геометрией здания.

Создан концептуальный проект:

- Разработан и оптимизирован тракт транспортировки протонного пучка к мишенным станциям.
- Сконструирован и оптимизирован тракт транспортировки протонного пучка для протонной терапии на входе в процедурную с однородностью $\pm 2,5\%$.

Результаты концептуального проекта представлены на семинарах отдела и ОПР, а также доложены на конференции RuPAC2021.