

ИНФОРМАЦИЯ
о направлениях и результатах научной (научно-исследовательской) деятельности и научно-
исследовательской базе для ее осуществления
за 2024 год
по образовательной программе
03.06.01 «Физика и астрономия», направленность: «Физика конденсированного состояния»
(1.3.8. «Физика конденсированного состояния»).

1. Направления научной (научно-исследовательской) деятельности:

- 1) Роль каскадных распадов вакансий в электронных оболочках атомов в воздействии ионизирующих излучений на вещество.
- 2) Механизмы взаимодействия слоистых алюмосиликатов с водой по данным инфракрасной спектроскопии.
- 3) Исследование координационного окружения атомов металлов в цеолитах и силикатных стеклах с помощью Фурье-трансформационного анализа околопороговой области рентгеновских спектров поглощения.
- 4) Рентгеновские эмиссионные спектры и зарядовое распределение ионов при каскадных распадах внутренних вакансий.

2. Результаты научной (научно-исследовательской) деятельности:

2.1. Выполнены хозяйственные и грантовые научные работы по темам:

- Теоретическое исследование механизмов передачи и поглощения энергии при использовании наночастиц в качестве радиосенсибилизаторов в радиотерапии (№ 220 (соглашение №22-72-00042) от 28.07.2022г).
- «Теоретическое описание и компьютерное Монте-Карло моделирование процессов каскадного распада вакансий и поглощения энергии в раковых клетках при оже-терапии онкологических заболеваний» (№ 320 (соглашение №23-22-00222) от 13.01.2023г).

2.2. Выполнены поисковые научные исследования по темам:

I. Результаты НИР, полученные в рамках реализации проекта РНФ № 22-72-00042, <https://rscf.ru/project/22-72-00042> «Теоретическое исследование механизмов передачи и поглощения энергии при использовании наночастиц в качестве радиосенсибилизаторов в радиотерапии» в 2024 г (руков. А.П. Чайников, проект успешно завершен).

Для золотых наночастиц различного диаметра, находящихся в водной среде, с помощью разработанной в рамках проекта компьютерной программы проведено Монте-Карло моделирование процессов ионизации и поглощения энергии при фотоионизации золотых НЧ фотонами с энергией от 10 до 100 кэВ и получены следующие результаты:

- объемные плотности энергии, поглощенной в воде вокруг золотой НЧ диаметра 10 нм в актах вторичной ионизации молекул воды электронным ударом и актах вторичной фотоионизации, в зависимости от расстояния от центра НЧ при различных значениях энергии ионизирующего НЧ первичного фотона от 10 до 100 кэВ;
- объемные концентрации чисел актов вторичной ионизации молекул воды электронным ударом и актов вторичной фотоионизации в зависимости от расстояния от центра золотой НЧ диаметра 10 нм при различных значениях энергии ионизирующего НЧ первичного фотона от 10 до 100 кэВ;
- объемные плотности энергии, поглощенной в воде вокруг золотой НЧ в актах вторичной ионизации молекул воды электронным ударом и актах вторичной фотоионизации, в зависимости от расстояния от центра НЧ при энергии первичных фотонов 40 кэВ для НЧ диаметром 2, 20 и 50 нм;
- объемные концентрации чисел актов вторичной ионизации молекул воды электронным ударом и числе актов вторичной фотоионизации в зависимости от расстояния от центра золотой НЧ, ионизированной фотоном с энергией 40 кэВ, для НЧ с диаметром 2, 20 и 50 нм;
- зависимости локальной поглощенной дозы в воде вблизи поверхности золотых НЧ с диаметрами 2, 20 и 50 нм при поглощении фотона с энергией 40 кэВ от расстояния от центра НЧ. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с результатами Монте-Карло моделирования, проведенного с помощью программного комплекса Geant4-DNA.
- зависимости коэффициента увеличения поглощенной дозы (dose enhancement ratio, DER) от расстояния от центра золотой НЧ при энергии падающих фотонов 40 кэВ для НЧ с диаметрами 20, 50 и 100 нм.

Установлено, что наибольшее значение локальной поглощенной дозы наблюдается в

непосредственной близости к поверхности НЧ. С увеличением расстояния от центра НЧ поглощенная доза достаточно быстро уменьшается, оставаясь, однако, вплоть до расстояний 160–180 нм больше типичного терапевтического значения. С увеличением диаметра НЧ поглощенная вблизи ее поверхности доза уменьшается, но на расстояниях от центра НЧ более 200 нм радиальные распределения поглощенной дозы для НЧ различного диаметра становятся практически одинаковыми.

Показано, что вблизи поверхности НЧ наибольший вклад в количество актов вторичной ионизации вносят испускаемые НЧ оже-электроны, а вдали от НЧ – фотоэлектроны. При этом с увеличением энергии первичных фотонов интервал расстояний, на котором вклад фотоэлектронов преобладает, становится шире и смещается дальше от центра НЧ.

II. Результаты НИР, полученные в рамках реализации проекта РНФ № 23-22-00222, <https://rscf.ru/project/23-22-00222/> «Теоретическое описание и компьютерное Монте-Карло моделирование процессов каскадного распада вакансий и поглощения энергии в раковых клетках при оже-терапии онкологических заболеваний» в 2024 г (руков. А.Г. Кочур, зав. каф. «Физика»).

II.1. Проведено моделирование процессов каскадного распада вакансий в различных внутренних электронных оболочках изолированных атомов Gd и Pt. Рассчитаны:

- зарядовые спектры конечных ионов;
- спектры электронов, испускаемых в ходе каскадных распадов вакансий;
- спектры фотонов, испускаемых в ходе каскадных распадов вакансий;
- средние энергии, переизлучаемые в ходе каскадных распадов вакансий вместе с электронами и фотонами;
- средние длины свободного пробега каскадных электронов и фотонов в воде.

II.2. Для атомов 127-I (стабильный изотоп), Gd и Pt, используемых в качестве радиосенсибилизаторов при фотонно-активационной терапии, рассчитаны следующие характеристики:

- зависимости средних энергий, переизлучаемых атомами вместе с каскадными электронами и фотонами в ходе каскадной релаксации вакансий, образующихся в результате фотоионизации, от энергии поглощаемого первичного фотона;
- зависимости средних длин свободного пробега в воде каскадных электронов и фотонов, а также фотоэлектронов, от энергии поглощаемого первичного фотона;
- зависимости средних энергий, передаваемых атомами-радиосенсибилизаторами в единичном объеме среды в единицу времени при единичной плотности потока падающих на среду первичных фотонов и единичной концентрации атомов-радиосенсибилизаторов, от энергии падающих первичных фотонов.

II.3. Проведено моделирование процессов каскадного распада вакансий в различных электронных оболочках 125-Te, образующихся в результате электронного захвата в радионуклиде 125-I и последующей внутренней конверсии в возбужденном ядре 125-Te. Получены:

- зарядовые спектры конечных ионов;
- спектры, испускаемых в ходе каскадной релаксации электронов и фотонов;
- энергии, уносимые каскадными электронами и фотонами.

III. Синтезированы соединения керамики $\text{La}_{1-x}\text{Cd}_x\text{MnO}_3$, $\text{A}_{1-x}\text{Cd}_x\text{MnO}_3$ ($\text{A}=\text{Pr}$, La), $\text{Pr}_{1-x}\text{Bi}_x\text{MnO}_3$. Исследованы рентгеноэлектронные спектры остовных уровней $\text{La}3d$ -, $\text{La}4d$ -, $\text{Cd}3d$ -, $\text{Mn}2p$ -, $\text{Mn}3s$ -, $\text{Pr}4d$ -, $\text{Bi}4f$ -. Как результат:

- Анализ профиля рентгеноэлектронных спектров и расчет показал, что ионы марганца находятся в Mn^{3+} и Mn^{4+} зарядовых состояниях;
- Определены концентрации элементов в исследуемых соединениях методом электронной нейтрализации образца;

IV. Оптимизирована межъядерная геометрия и электронная структура модельной хиральной системы для достижения максимального кругового фотоэлектронного дихроизма (PECD) при ее однофотонной ионизации циркулярно поляризованным светом. Расчеты электронной структуры выполнены одноцентровым методом, в то время как оптимизация выполнена с использованием квантовой алхимии с использованием разложения в ряд Тейлора. Таким образом, влияние длин связей и нескомпенсированных распределений заряда на хиральный отклик модели исследовано теоретически в деталях.

- Продемонстрировано, что манипулирование хиральной асимметрией ионного потенциала может улучшить параметр дихроизма (PECD) случайно ориентированной модельной системы далеко за

пределами $\beta_1 = 25\%$.

- Показано, что квантовая алхимия применима к PECД, несмотря на необычно сильную связь пространственных и электронных степеней свободы, и обсуждено относительное влияние отдельных степеней свободы в этой модельной системе. Используя разработанный подход, определены необходимые условия для вычислительного проектирования PECД для реальных (немодельных) хиральных молекул.

V. Разработана методика для расчета энергий и волновых функций основного состояния изолированной молекулы соляной кислоты. При этом молекулярная орбиталь представлена в виде суперпозиции симметризованных функций с фиксированным орбитальным угловым моментом относительно выбранного начала координат молекулы.

- В качестве волновых функций нулевого приближения взяты одноканальные разложения молекулярных орбиталей и полученная система уравнений применена для расчета волновых функций и энергий валентных 4σ и 5σ состояний молекулы HCl, находящейся в равновесном состоянии.
- Учтены все возможные типы диаграмм второго порядка, содержащие в начальном состоянии $3s$ -дырку и в конечном – две $3p$ -дырки и один $3d$ -электрон. Кроме того, перебраны все возможные промежуточные квантовые числа i, j, m, n в этих диаграммах.
- Для учета суммы по главному квантовому числу n сделано предположение, что функции высоковозбужденных одноэлектронных (ридберговских) состояний дискретного спектра имеют водородоподобный вид.

VI. Теоретически исследовано четырежды дифференциальное сечение расщепления рентгеновского фотона неоноподобным атомным ионом. Установлены ярко выраженные эффекты возникновения трех резонансных структур сечения расщепления и его угловой анизотропии в соответствующих схемах эксперимента. При этом:

- Дана оценка абсолютной величины максимума «наблюдаемого» сечения расщепления в предполагаемом эксперименте с рентгеновским лазером на свободных электронах.
- Представлена конструкция расширенного пространства Гильберта (EHS) в виде прямой суммы пространств векторов конечной и бесконечной нормы как основного пространства в математическом формализме квантовой механики многоэлектронного атома.
- Дана реализация EHS-конструкции для решений уравнений самосогласованного поля Хартри-Фока.

VII. На основе компьютерного моделирования и многоциклических компрессионных испытаний грунтового материала нагрузками эквивалентными поездным воздействиям, разработаны методики: регулирования интенсивности движения на участке с учетом фактических физико-механических свойств грунтов земляного полотна и прогнозирования дополнительных осадок насыпи, в процессе ее жизненного цикла. Кроме того:

- Детальный анализ зависимостей пиковой интенсивности диффузной полосы валентных колебаний воды от времени в начале сушки позволяет сделать вывод, что при спектральных исследованиях увлажненных образцов каолинита для обеспечения влажности увлажненного образца с точностью 0,3% время эксперимента не должно превышать 30 с.
- Разработана технология создания цифрового паспорта балластного материала, базирующаяся на обработке и анализе спектральных данных методом главных компонент PCA (*Principal Component Analysis*).

2.3 Публикационная работа:

- Количество изданных статей в изданиях, рекомендованных ВАК – 2.

Количество изданных статей в изданиях, входящих в международные базы данных – 11.

- Количество изданных монографий – 0.

2.4 Результаты интеллектуальной деятельности (РИД):

- Количество полученных патентов – 0.

- Количество полученных свидетельств о регистрации объекта интеллектуальной собственности – 0.

2.5. Участие в научных конференциях:

Количество конференций, в которых приняли участие НПП. Всего за год – 7,

из них – международного уровня – 7

3. Научно-исследовательская база для осуществления научной (научно- исследовательской) деятельности

Кафедра располагает современными лабораториями, оснащенными современным оборудованием - комплексами для проведения лабораторных работ по механике, молекулярной физике, электричеству и магнетизму, оптике и атомной физике.

1. В306, В 308 «Лаборатория механики» (комплект оборудования «Механика», «Молекулярная физика и термодинамика»).

2. Лаборатория спектральных, оптических и физико-механических исследований. Оборудование: **Система анализа поверхности фирмы SPECS** (Включает в себя пять методов анализа поверхности, в том числе: фотоэлектронная, рентгеноэлектронная и ожеэлектронная спектроскопии, растровая электронная микроскопия); **Комплекс исследования механических свойств материалов на наноуровне NANOTEST 600** (Методы наноиндентирования и исследования механических свойств твердых тел в субмикрообъемах, тонких приповерхностных слоях: диапазон перемещения по глубине до 100 мкм. Разрешение по глубине до 0.001 нм. Диапазон перемещения по осям x-y-z 50x50x50 мм. Разрешение перемещений по осям до 0.05 мкм. Диапазон нагрузок до 20 Н. Разрешение по нагрузке до 30 нН); **универсальный растровый электронный микроскоп Zeiss EVO MA 18 РЭМ** – (основной инструмент при проведении анализа материалов во всех областях материаловедения. Максимальное разрешение микроскопа – 3 нм (30 кВ, SE, W), ускоряющее напряжение – 0,2 – 30кВ, увеличение - 5 – 1 000 000х, детекторы SE – вторичных электронов, HDBSD – детектор обратнорассеянных электронов).