



ОТДЕЛЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РАЗРАБОТОК

Отделение перспективных разработок (ОПР) было образовано в 2013 г. Отделение возглавил В. Ф. Ежов, с 2017 г. по настоящее время руководитель ОПР – А. В. Титов. Исследования ОПР нацелены на поиск решений особо значимых научно-технических проблем ядерной и ускорительной физики, всемерное развитие теоретической квантовой химии, а также химии и спектроскопии углеродных материалов. Существенны успехи Отделения в области информационных исследований, направленных, в частности, на разработку и поддержку программных комплексов для эксперимента ATLAS на Большом адронном коллайдере (ЦЕРН). Большое внимание в ОПР уделяется разработкам голографических информационно-измерительных систем, а также химико-биологическим и медицинским исследованиям.

Приборная база ОПР представлена двумя базовыми установками Института. Это протонный синхротрон СЦ-1000 и изохронный циклотрон Ц-80. Они позволяют проводить широкий круг научных и прикладных исследований в различных областях – от ядерной физики до медицины. В состав ОПР входят:

- Лаборатория химии и спектроскопии углеродных материалов;
- Лаборатория голографических информационно-измерительных систем;
- Лаборатория квантовой химии;
- Ускорительный отдел, включающий Лабораторию физики и техники ускорителей;
- Отдел информационных технологий и автоматизации, включающий Лабораторию информационно-вычислительных систем;
- Отдел прикладной ядерной физики, включающий Лабораторию электронного и программного обеспечения и Лабораторию радиационной физики.

УСКОРИТЕЛЬНЫЙ ОТДЕЛ

История Ускорительного отдела (УО) неразрывно связана с созданием синхротрона СЦ-1000, строительство которого началось в 1959 г.

Протонный синхротрон СЦ-1000

СЦ-1000 является единственной надежной, стабильно работающей установкой в России, на мишенях которой можно получать спектр переменных энергий протонов ~ 60–1 000 МэВ с шагом 50 МэВ. СЦ-1000 успешно функционирует с 1970 г.

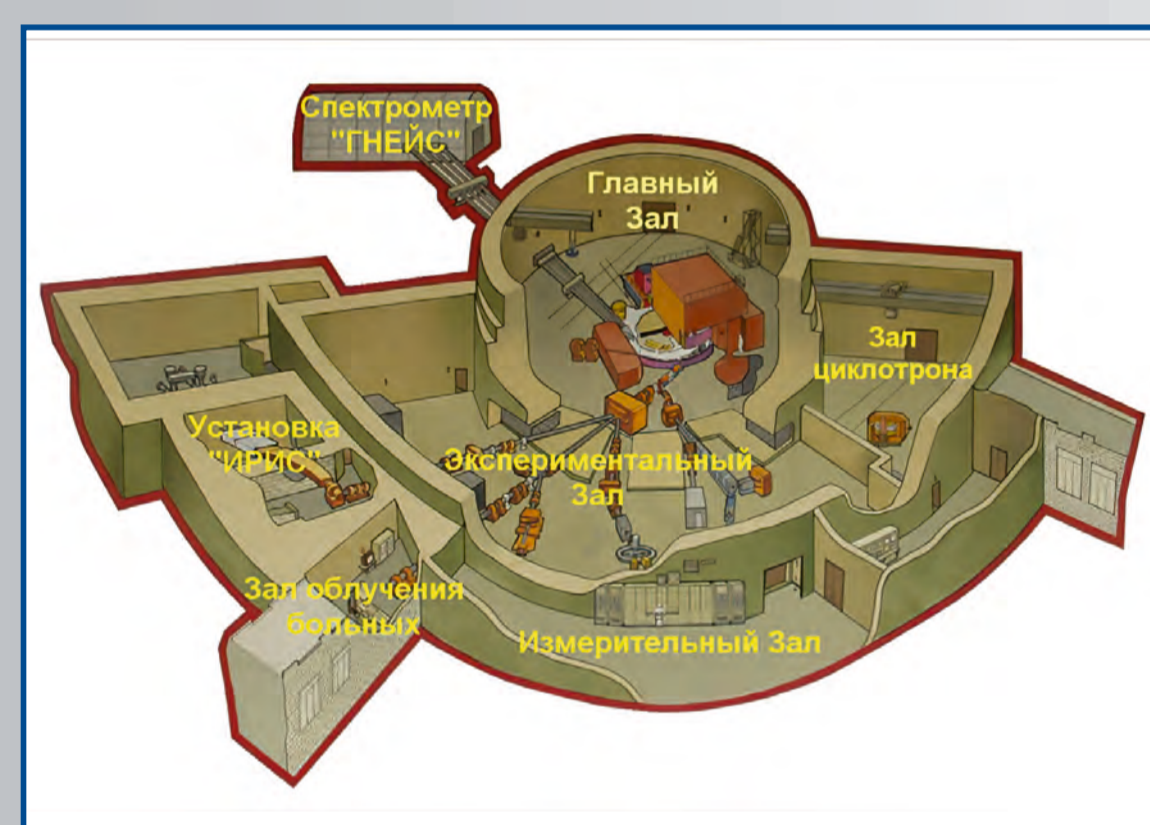


Основные задачи

- Фундаментальные и прикладные исследования в области ядерной физики ($E = 60 - 1000$ МэВ).
- Нейтронная физика (ГНЕИС).
- Исследования в области физики твердого тела.
- Исследования и испытания электронной компонентной базы на радиационную стойкость.
- Исследования в области ядерной медицины и биологии.
- Тестирование регистрирующей аппаратуры для использования в исследованиях на отечественных и зарубежных ускорителях.

Параметры самого синхротрона (энергия, интенсивность, временная структура пучка, а также созданный экспериментальный комплекс) определяют его уникальность:

- мюонный канал (μ SR-установка, единственная в РФ);
- π -мезонный канал высоких энергий (единственный в РФ);
- π -мезонный канал низких энергий обеспечивает $P_{\pi} = 28$ МэВ/с, остановки в газах (единственный в РФ);
- масс-сепараторный комплекс ИРИС – ISOL;
- нейтронный времяпролетный спектрометр ГНЕИС (единственный в РФ);
- магнитный анализатор пролетный (МАП) – высокоэнергетичный магнитный спектрометр;
- комплекс протонной терапии на протонах 1 000 МэВ («Гатчинский метод»);
- комплекс радиационных испытаний электронной компонентной базы на радиационную стойкость в протонных и нейтронных пучках (единственный в РФ).



Изохронный циклотрон Ц-80



В НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ разработаны и реализуются проекты комплекса ядерной медицины «Око» и «Изотоп» на базе изохронного циклотрона Ц-80. Для этих целей будут произведены частичная реконструкция корпуса 2 и строительство нового здания, куда силами УО и НИИЭФА им. Д. В. Ефремова будет перемещен Ц-80.

- Проект «Изотоп»: пучок протонов переменной энергии 40–80 МэВ с током выведенного пучка 100 мкА нацелен на создание на Ц-80 радиоизотопного комплекса для развития методов наработки радионуклидов, разработки инновационных методов их выделения и производства радиофармпрепаратов на их основе.
- Проект «Око»: второй пучок протонов с энергией 70 МэВ с током выведенного пучка 10 мкА направлен на создание онкофтальмологического комплекса на Ц-80 для пациентов (в первую очередь Северо-Западного региона России) с опухолями внутриглазными, орбиты, а также с поверхностно расположенными опухолями головы и шеи.

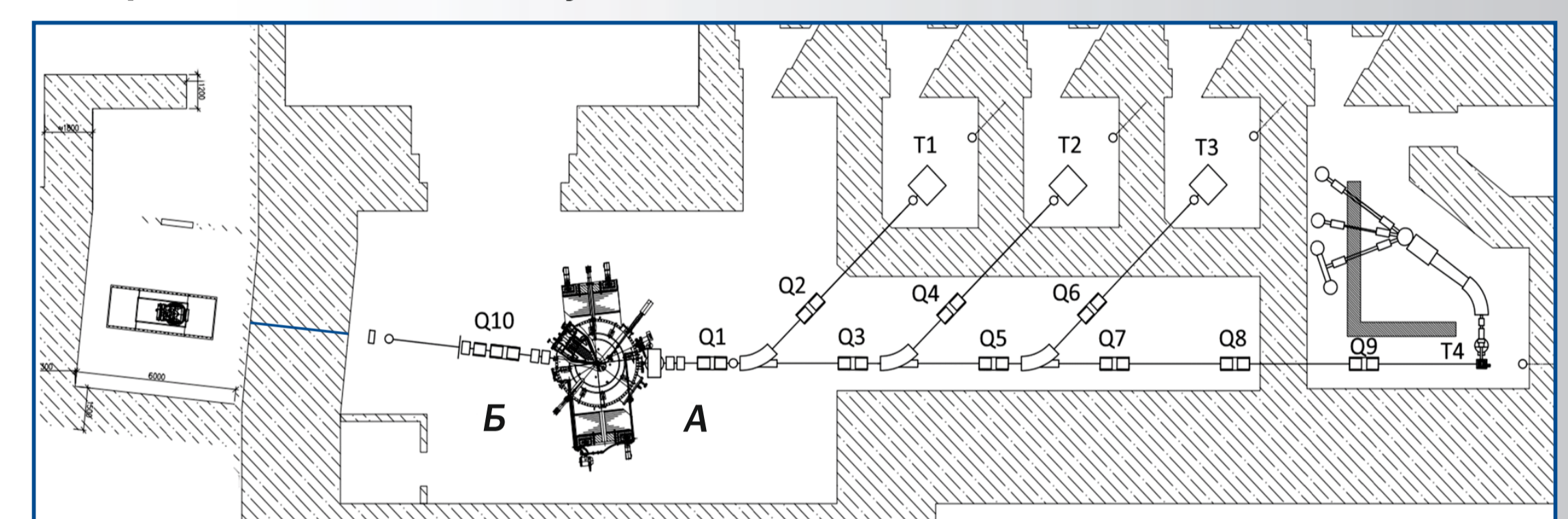


Схема проекта и оптимальных линий транспортировки:
А – тракты для структуры «Изотоп», где Q1–Q9 – дублеты линз, T1–T4 – мишенные станции (справа);
Б – тракт транспортировки для офтальмологического онкологического комплекса «Око», где Q10 – триплет линз (слева)

ОТДЕЛ ПРИКЛАДНОЙ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Отдел прикладной ядерной физики (ОПЯФ) был создан в 2017 г., в его состав входит Лаборатория радиационной физики (ЛРФ).

К основным задачам отдела относятся:

- исследование воздействия радиации на материалы, электронные компоненты и приборы; разработка методов детектирования и формирования пучков протонов и нейтронов различных энергий;
- проведение исследований взаимодействия нейтронов с атомными ядрами, измерение ядерных констант;
- обеспечение экспериментальных установок аппаратно-программными средствами для автоматизации научных исследований и технологических процессов.

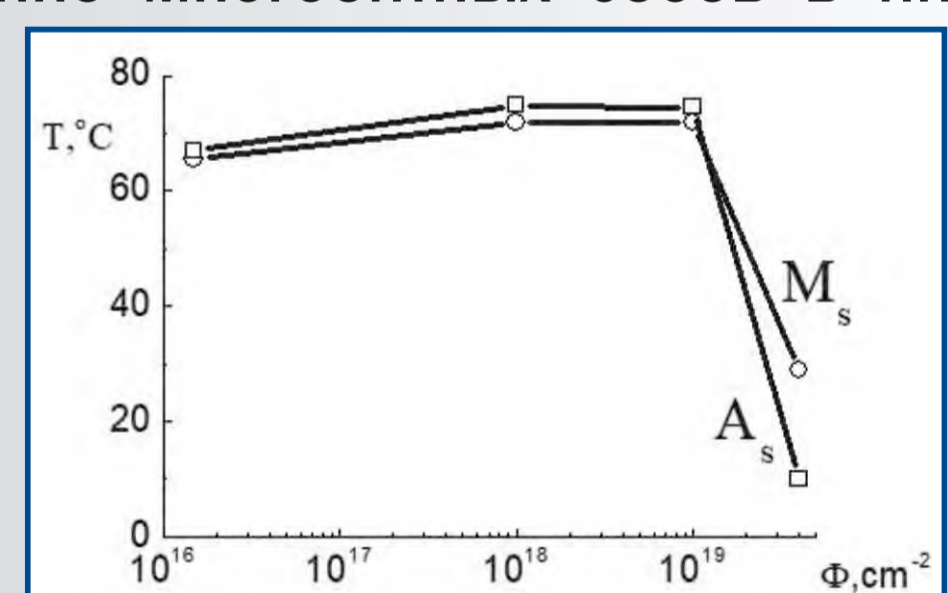
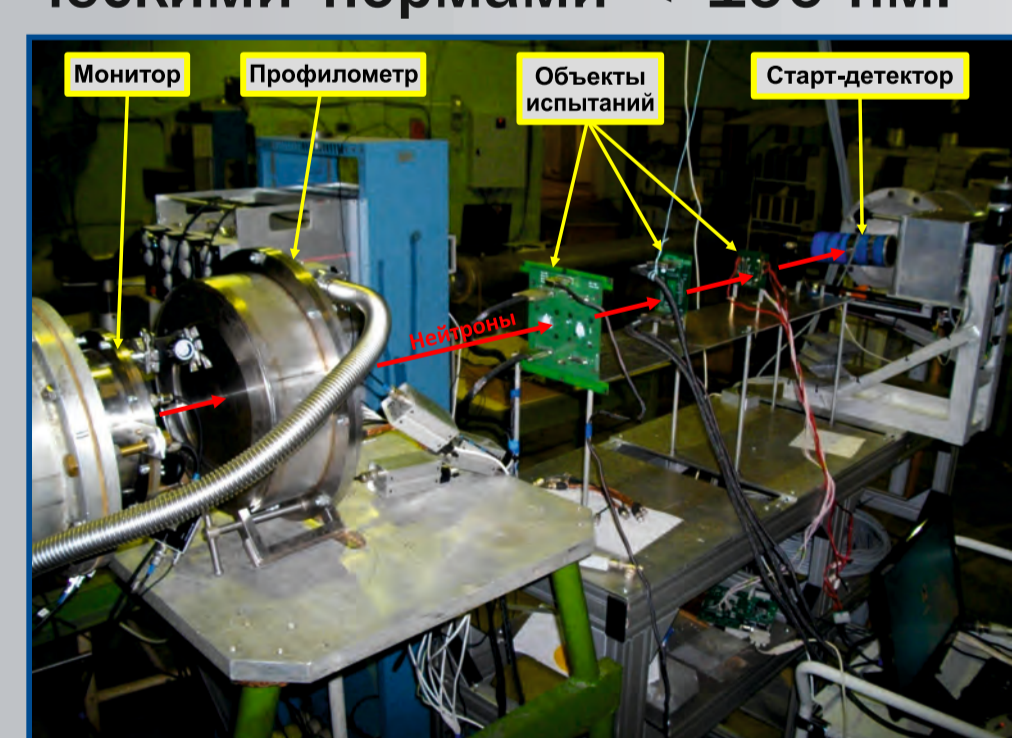
С 2020 г. получили развитие новые направления исследований, связанные как с изучением свойств новых материалов (нанотрубок, графенов, фуллеренов, жидких кристаллов), так и физических процессов, протекающих в этих материалах под действием лазерного излучения.

Базовой установкой ЛРФ является нейтронный времяпролетный спектрометр ГНЕИС, созданный на базе синхротрона СЦ-1000. Сегодня на ГНЕИС также организован нейтронный испытательный стенд ИСНП/ГНЕИС для проведения испытаний радиационной стойкости электронной компонентной базы авиакосмического назначения. В ОПЯФ было разработано и изготовлено оборудование для исследования водной толщ подледникового озера Восток. Его испытания были проведены на антарктической станции «Восток».

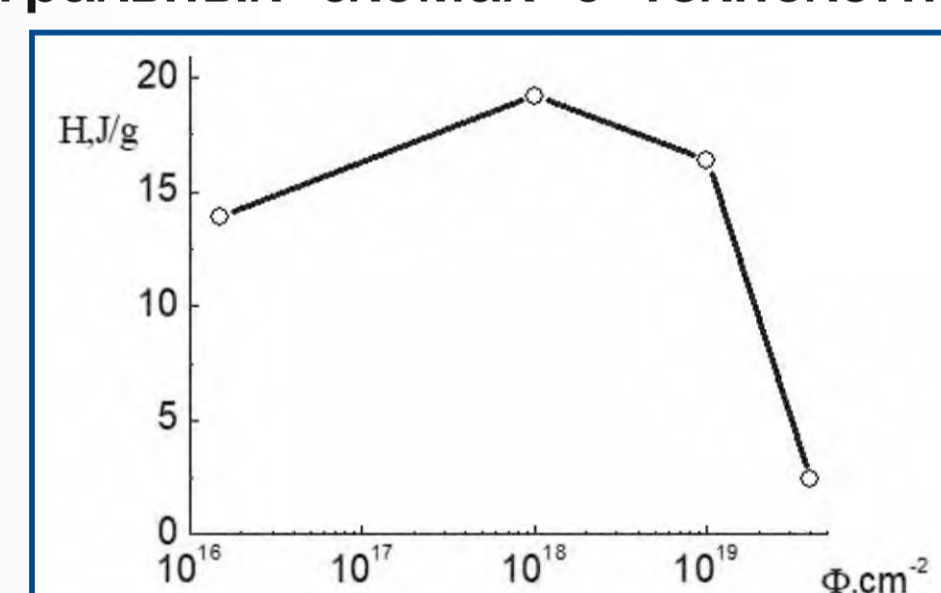
ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕЙСТВИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МАТЕРИАЛЫ, ЭЛЕКТРОННЫЕ КОМПОНЕНТЫ И ПРИБОРЫ

Дозовые эффекты: облучение сплава TiNiCu флюенсом $> 1 \cdot 10^{19}$ см⁻² в аморфном состоянии приводит к деградации фазового превращения в материале после кристаллизации.

Одиночные эффекты: исследование многобитных сбоев в интегральных схемах с технологическими нормами < 100 нм.

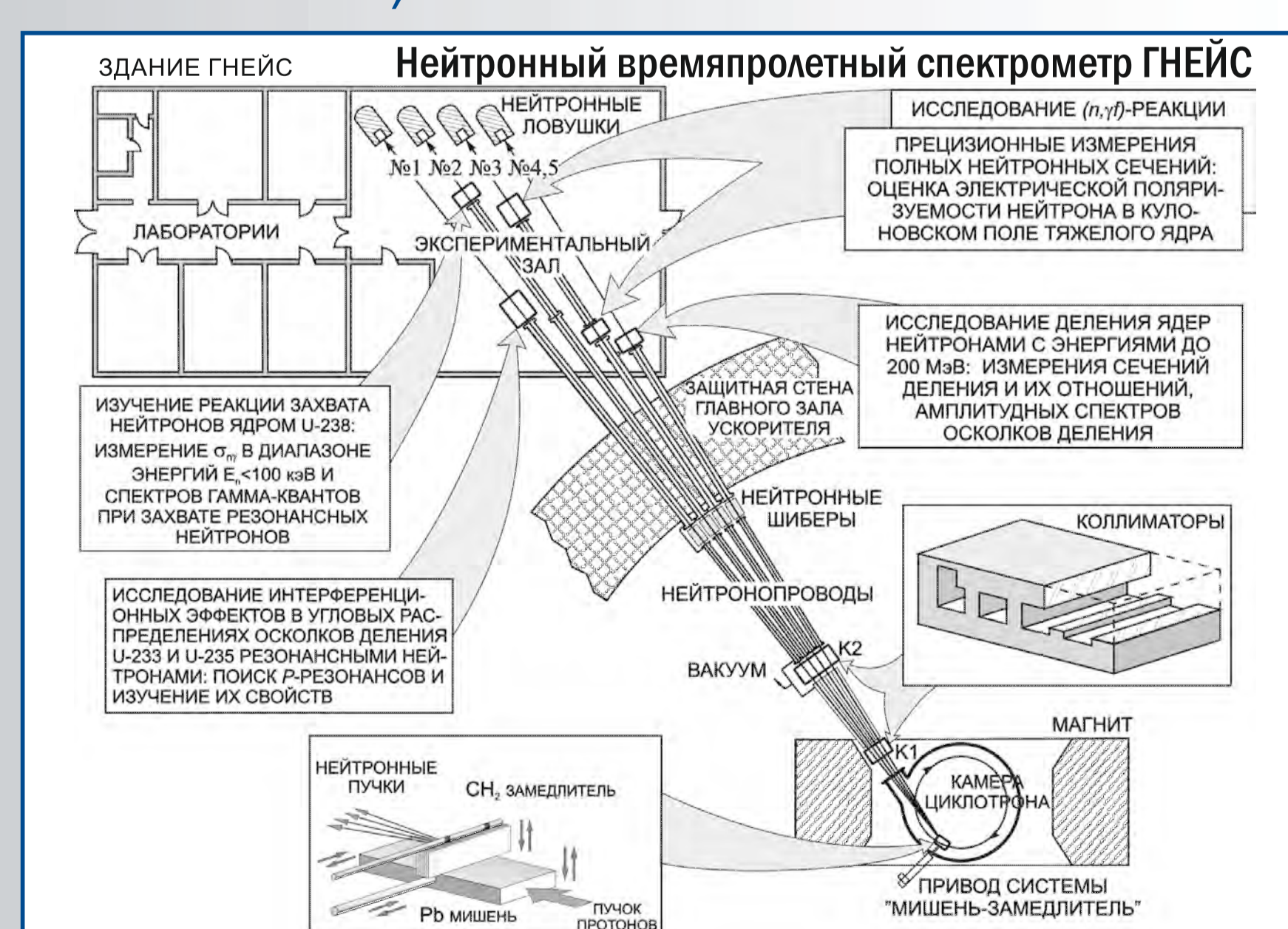


Температуры превращений после облучения в аморфном состоянии и кристаллизации



Энтальпия фазового превращения после облучения в аморфном состоянии и кристаллизации

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НЕЙТРОНОВ С АТОМНЫМИ ЯДРАМИ И ИЗМЕРЕНИЯ ЯДЕРНЫХ КОНСТАНТ В ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ 0,01 эВ – 300 МэВ

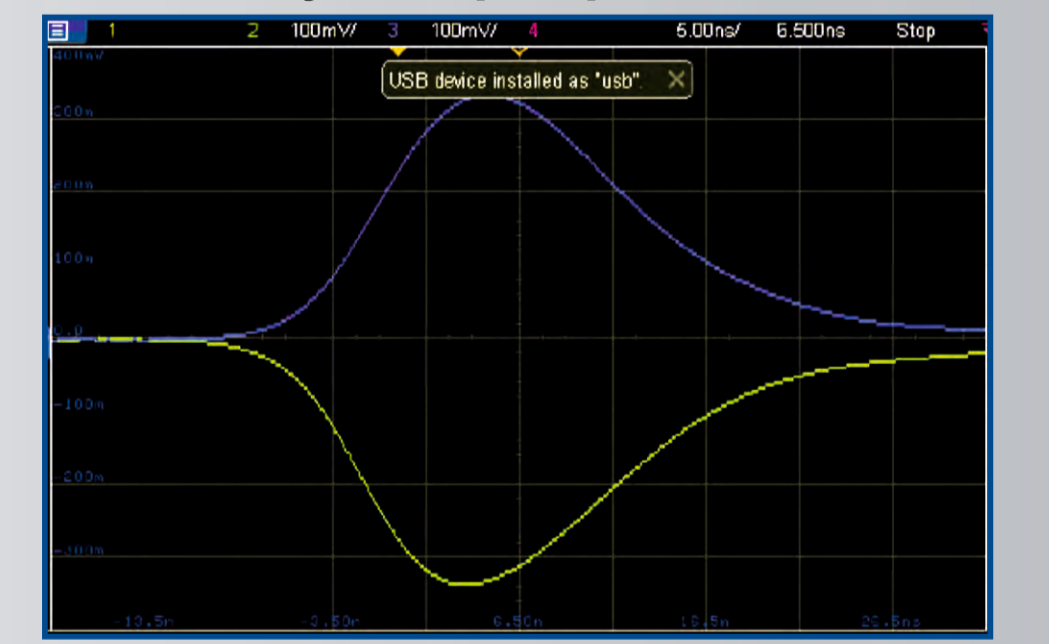


РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СОВРЕМЕННЫХ ДЕТЕКТОРОВ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

Современные микроструктурные детекторы ионизирующих излучений (ИИ):

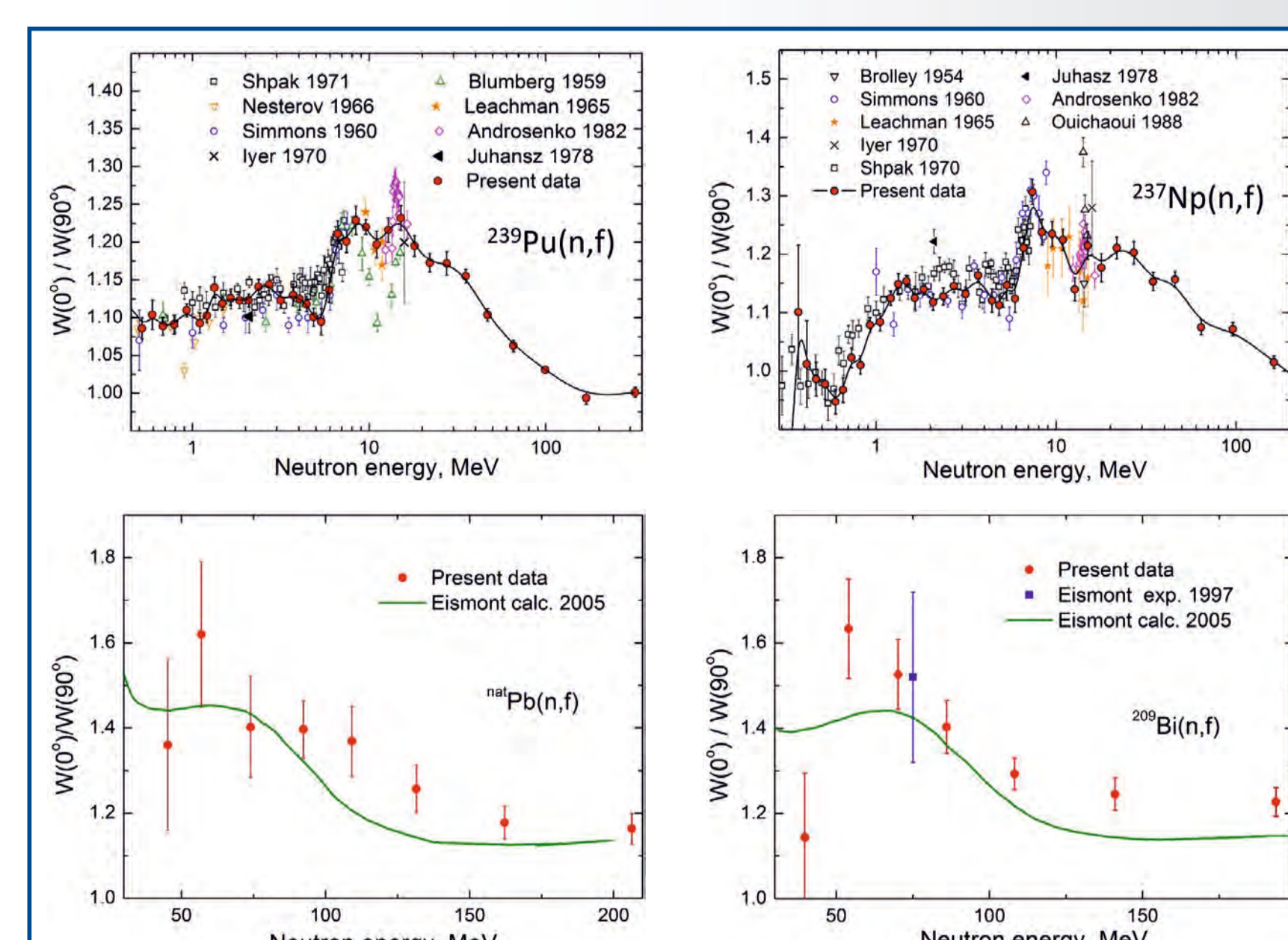
- двухкоординатные детекторы ИИ на основе умножения первичного заряда в микроотверстиях колодезного типа с резистивным дном из тонкопленочного алмазоподобного углерода (3 патента ПИЯФ);
- двухкоординатные детекторы ИИ с умножением первичного заряда между микропроволочками (2 патента ПИЯФ).

Детекторы на порядок превосходят многопроволочные камеры по нагрузочной способности и пространственному разрешению. Их особенность – минимум водородсодержащего вещества на пути излучения, что привлекательно для регистрации тепловых и холодных нейтронов.



Сигналы от источника ⁵⁵Fe (5 нс/деление; 100 мВ/деление)

ИЗМЕРЕНИЯ УГЛОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ И АНИЗОТРОПИИ ОСКОЛКОВ ДЕЛЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЯДЕР НЕЙТРОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ 1–200 МэВ



Получаемые результаты важны для совершенствования модельных представлений о механизмах протекания нейтронно-ядерных реакций и развития новых нейтронных технологий, в частности связанных с использованием ADS-систем (Accelerator Driven System) в таких областях, как ядерная энергетика, радиационные испытания материалов, ядерная медицина.

ЛАБОРАТОРИЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

Лаборатория голографических информационно-измерительных систем (ЛГИИС), созданная в 1968 г., – один из мировых лидеров в области прецизионных измерений на масштабах нанометров. На базе ЛГИИС и уникальных стендов для синтеза линейных и радиальных голографических дифракционных решеток выпускается 14 различных нанотехнологических устройств и приборов. Это фотоэлектрические преобразователи линейных и угловых перемещений, длиномеры, двух-, трех-, четырех- и более координатно-измерительные машины, радиусо- и плоскомеры, поворотные столы для измерения с разрешением 10 нм и точностью до сотых долей секунды. Впервые в мире создана линейная голографическая решетка длиной 1 300 мм и разрешением 1 нм.



Ультрапрецизионный двухшпиндельный наноизмерительный поворотный стол голографический для сертификации управляющих электродвигателей в ракетостроении (мировой рекорд $\pm 0,2''$)



Ультрапрецизионная трехкоординатная наноизмерительная машина голографическая для измерения деталей космических изделий (мировой рекорд $\pm 1,2$ мкм)



ОТДЕЛЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РАЗРАБОТОК

ЛАБОРАТОРИЯ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

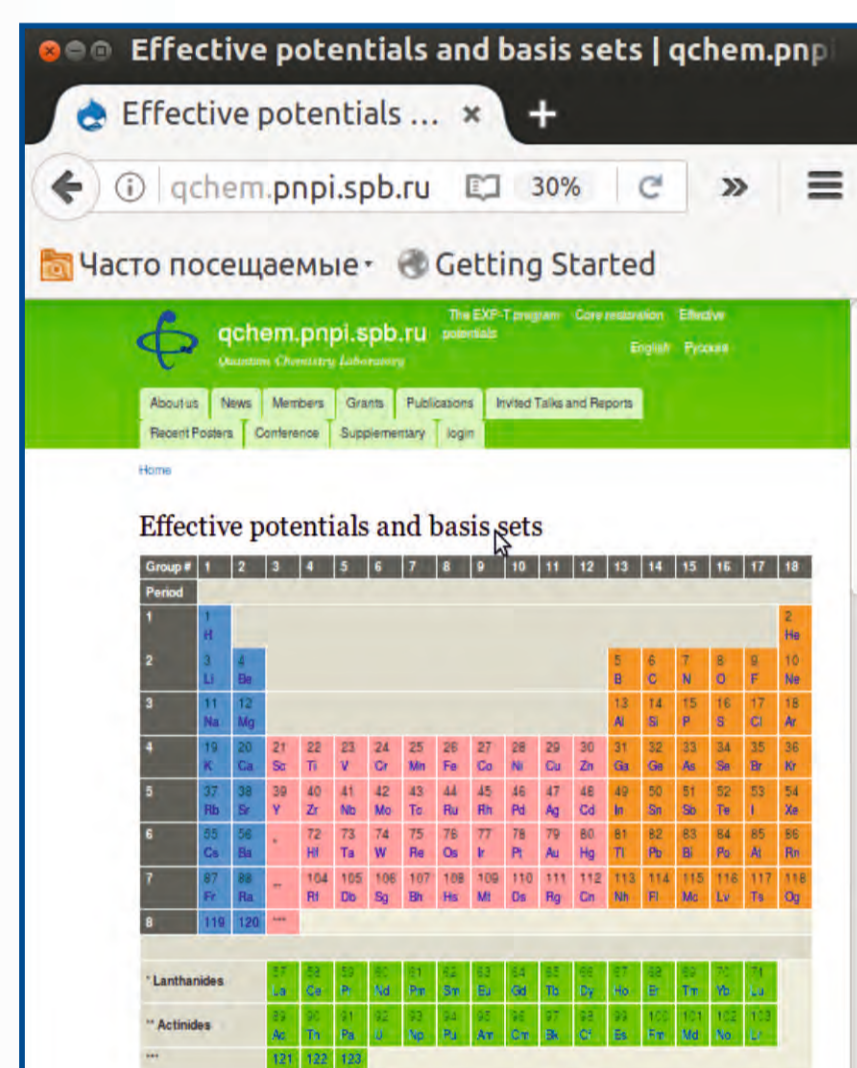
Лаборатория квантовой химии (ЛКХ) была основана в 2014 г. Основное направление деятельности: развитие методов расчета электронной структуры молекул и материалов, содержащих тяжелые элементы. К настоящему времени точность, достигнутая в этих расчетах, является рекордной в мире. Разработка новых эффективных методов, алгоритмов и программных пакетов для прецизионного моделирования электронной структуры и свойств тяжелых элементов позволила начать исследование свойств соединений лантаноидов, актиноидов и тяжелых переходных металлов, перейти к расчетам твердофазных систем и провести исследование химических свойств сверхтяжелых элементов из «острова нестабильности».

ГЕНЕРАЦИЯ ПРЕЦИЗИОННЫХ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛОВ



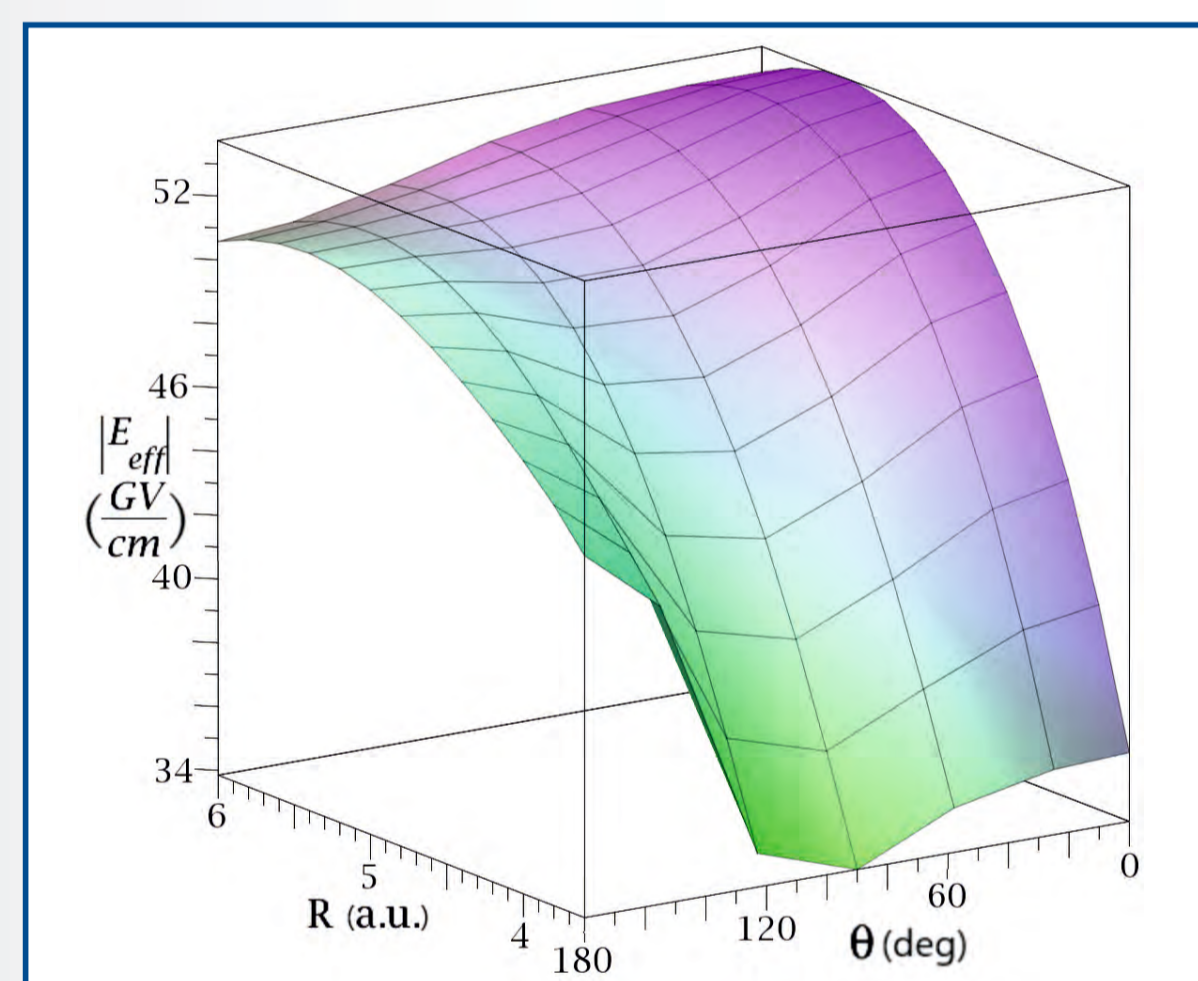
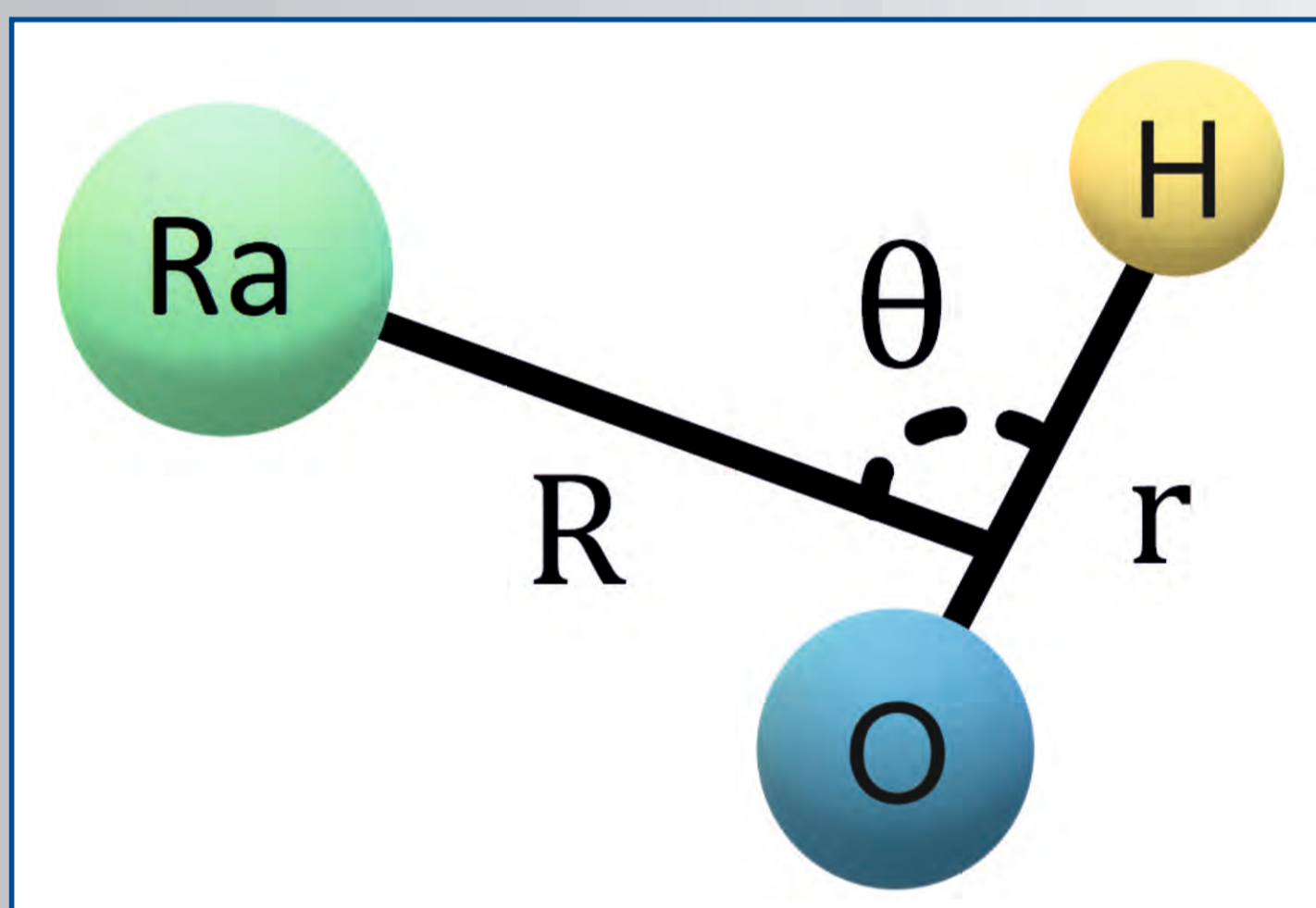
В 2021 г. завершено построение обобщенных, или гатчинских, вариантов релятивистских псевдопотенциалов для прецизионного моделирования валентной электронной структуры для всех элементов Периодической таблицы Д. И. Менделеева.

Метод обобщенного релятивистского псевдопотенциала позволяет с высокой точностью учесть релятивистские эффекты (такие как дарвинская поправка, поправка на изменение массы электрона с увеличением его скорости, спин-орбитальное взаимодействие), основную часть брейтовских межэлектронных взаимодействий (которые представляют собой релятивистские поправки к стандартным кулоновским взаимодействиям), а также вклады от квантово-электродинамических эффектов (описываемых диаграммами собственной энергии и поляризации вакуума) и конечного размера ядра атома (с использованием модели Ферми для описания распределения заряда внутри ядра) в рамках простой модели с формально нерелятивистской кинетической энергией, точечной моделью ядра и кулоновскими взаимодействиями между явно рассматриваемыми электронами.



P, T-НЕЧЕТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МОЛЕКУЛЕ RaOH

Получены колебательно-вращательные волновые функции трехатомной молекулы RaOH для первых колебательных уровней, впервые вычислено значение I-удвоения и исследовано влияние поперечных колебаний в возбужденном колебательном состоянии на чувствительность молекулы к P, T-нечетным эффектам (электрический дипольный момент электрона (eADM) и скалярно-псевдоскалярное электрон-ядерное взаимодействие).

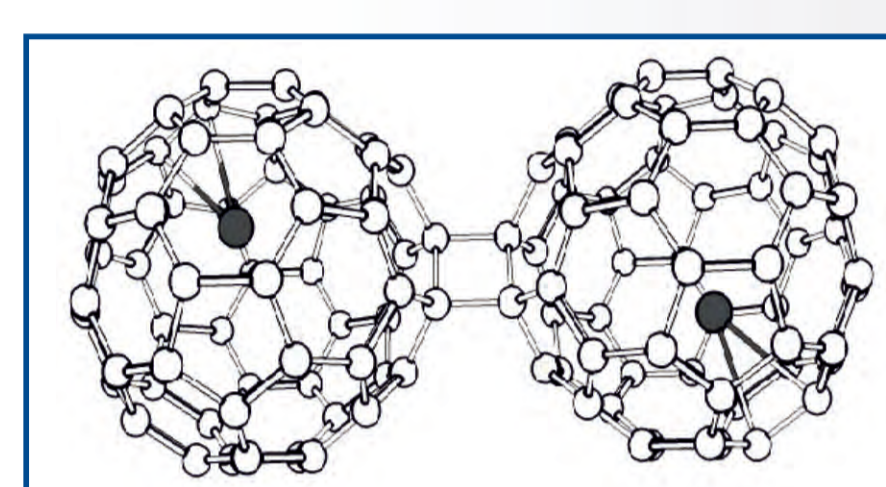


Зависимость чувствительности к eADM (E_{off}) от геометрии 3-атомной молекулы RaOH

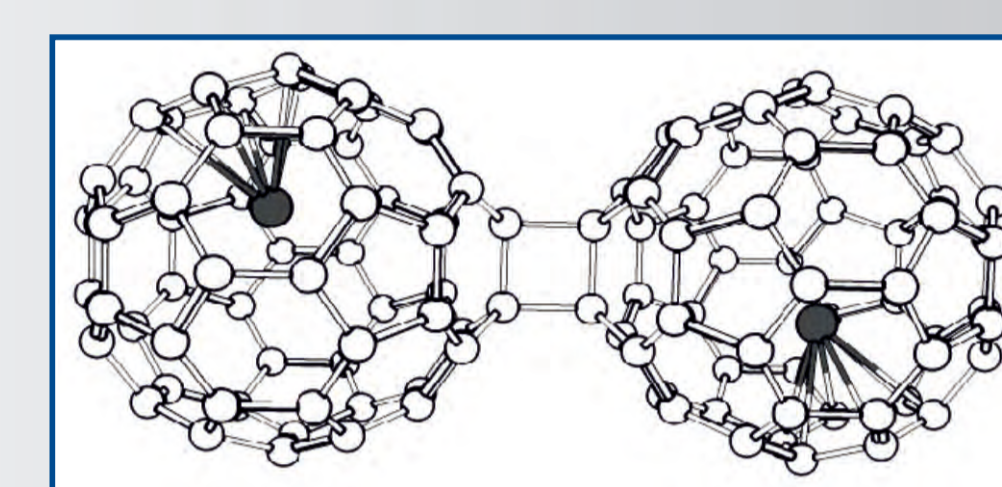
Zakharova A.V., Petrov A.N. Phys. Rev. A, v. 103, p. 032819 (2021).

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ $Eu@C_{60}$ И $(Eu@C_{60})_2$

Исследована структура молекул $Eu@C_{60}$. (C_{2v})-Таутомер включает гексагональную пирамиду EuC_5 ; (C_{2v})-таутомер включает фрагмент EuC_2 со связью C=C, общей для двух 6-атомных циклов. Различия энергий таутомеров < 0,05 эВ. Энергетические барьеры допускают псевдообращение. Для близких по энергии димеров $(Eu@C_{60})_2$ и $(Eu@C_{60})_2$ величины квадрата спина $\langle S^2 \rangle$ достигают 56 и 90 а. е. соответственно. Эндоатом повышает химическую активность фуллера.



$(Eu@C_{60})_2$

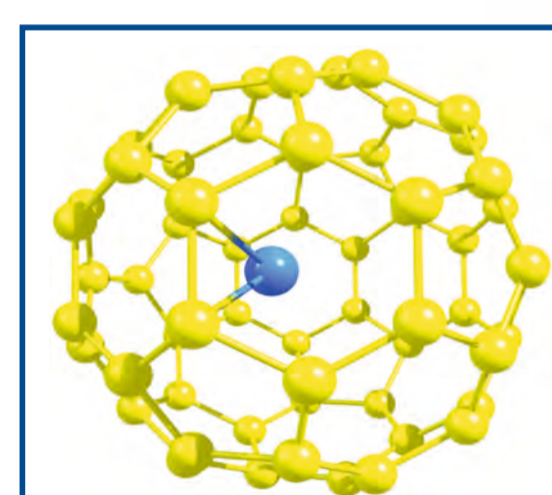


$(Eu@C_{60})_2$

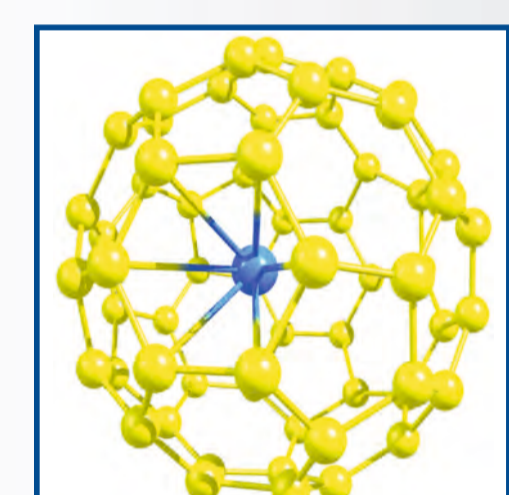
Семенов С. Г., Бедрина М. Е., Титов А. В. ЖОХ, т. 90, с. 613 (2020); Russ. J. Gen. Chem., v. 90, p. 667 (2020); Semenov S.G., Bedrina M.E., Andreeva T.A., Titov A.V. Eur. Phys. J. D., v. 76, p. 253 (2022).

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛ $Yb@C_{60}$, $Yb@B_2C_{58}$ И $Gd@B_3C_{57}$

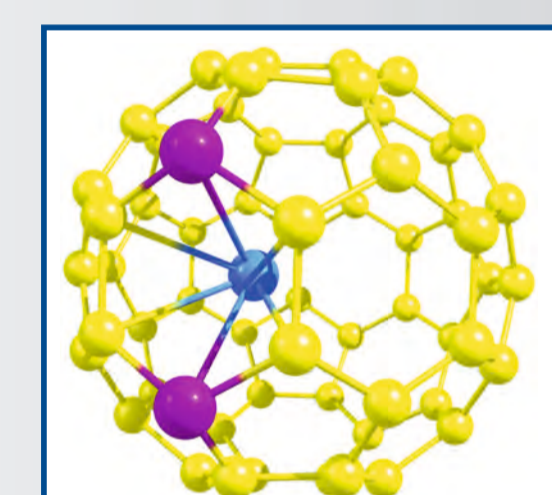
Определена структура молекул $Yb@C_{60}$, $Yb@C_{60}$, $Yb@B_2C_{58}$, $Gd@B_3C_{57}$, анионов $(1,4-B_2C_{58})^{2-}$, $(1,3,5-B_3C_{57})^{3-}$ и свободных радикалов B_nC_{60-n} . Эндоатом координирован связью C=C в $Yb@C_{60}$ и диборатациклогексатриеновым фрагментом в $Yb@B_2C_{58}$. Симметричное замещение трех атомов циклогексатриенового фрагмента влечет перегруппировку с формированием уникальной структуры, включающей 3-атомный, три 8-атомных и три 4-атомных цикла. Энергия связи лантанида с гетерофуллереном в $Ln@B_nC_{60-n}$ больше энергии связи иттербия в $Yb@C_{60}$.



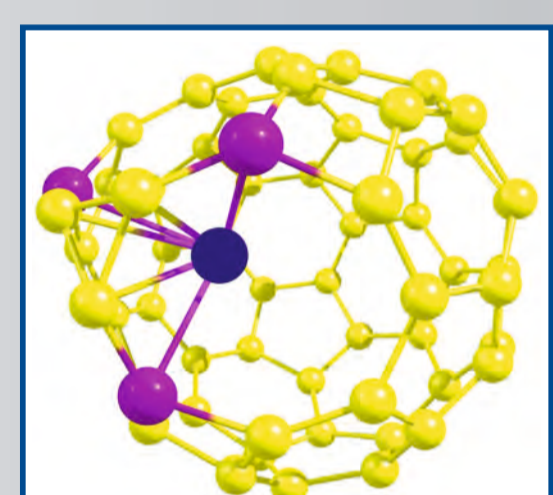
$Yb@C_{60}$



$Yb@B_2C_{58}$



$Yb@B_3C_{57}$



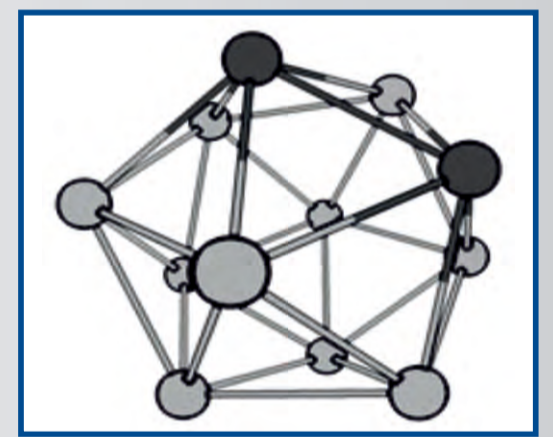
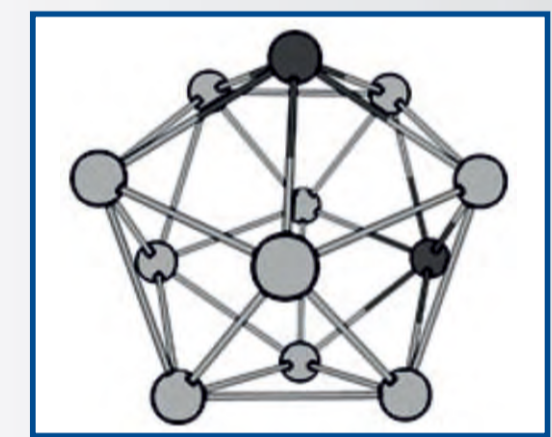
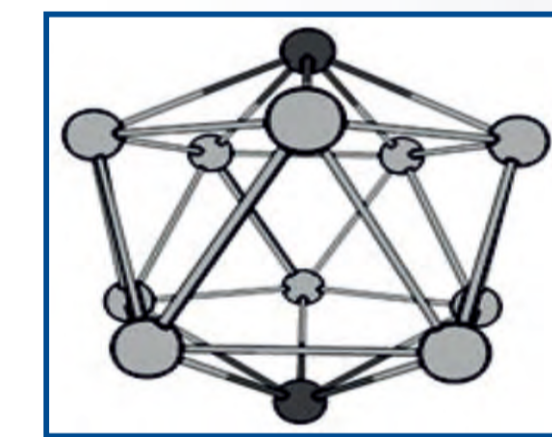
$Gd@B_3C_{57}$

Захарова А. В., Семенов С. Г., Бедрина М. Е., Титов А. В. ЖОХ, т. 90, 320 (2020).

ТРЕХАТОМНЫЕ СВЯЗИ В КЛАСТЕРАХ $closo-Sb_2Sn_{10}$

Исследована локализация электронов в Sb_2Sn_{10} и аналогичных полых кластерах. Стабильность кластера со структурой искаженного икосаэдра обеспечивают 13 связывающих электронных пар, которые заселяют 20 орбиталей, локализованных вблизи треугольных граней. Все атомы сохраняют неподеленные электронные пары.

Валентность олова 2,43–2,57 больше числа валентно-активных электронов, но меньше координационного числа. Валентность сурьмы 2,80–2,81 соответствует числу валентно-активных электронов.



Изомеры кластера $closo-Sb_2Sn_{10}$

Семенов С. Г., Бедрина М. Е., Клемешев В. А., Титов А. В. ЖОХ, т. 90, с. 791 (2020); т. 91, с. 290 (2021); Russ. J. Gen. Chem., v. 90, p. 877 (2020); v. 91, p. 241 (2021); Int. J. Quant. Chem. (2022), doi 10.1002/qua.27046

ОТДЕЛ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И АВТОМАТИЗАЦИИ

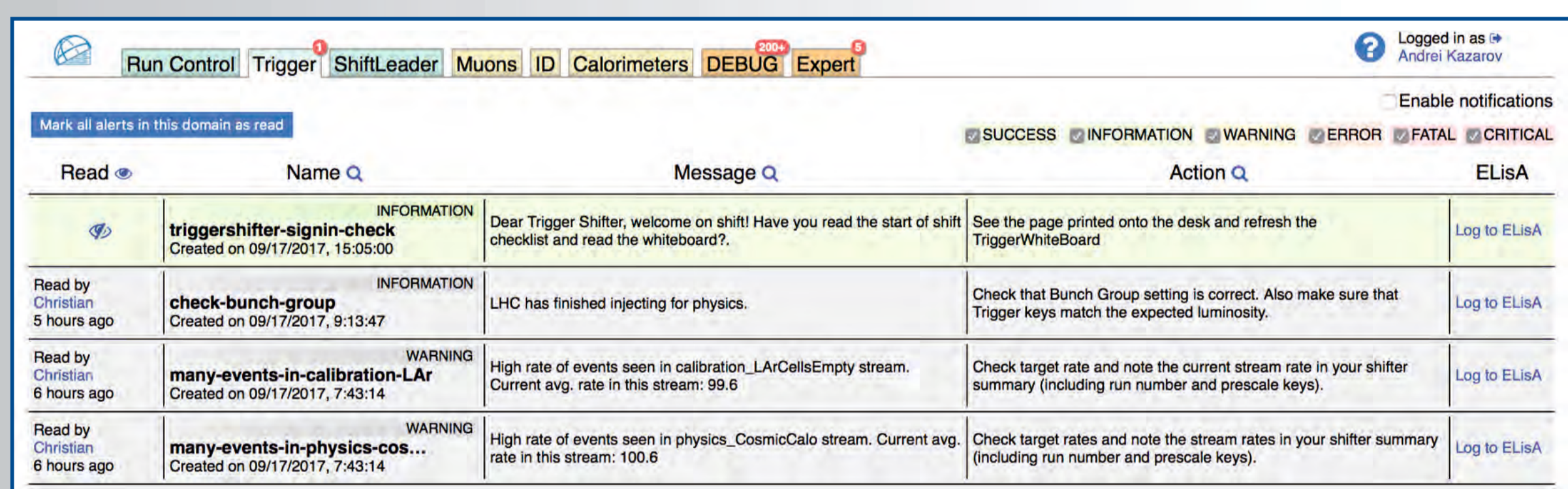
Отдел был образован в 1992 г. Основными направлениями деятельности отдела в настоящее время являются:

- участие в разработке и эксплуатации системы сбора данных и системы контроля детектора для эксперимента ATLAS в ЦЕРН (DAQ/DCS);
- создание, поддержка и развитие информационно-вычислительных систем для автоматизации управленческих и финансово-экономических задач Института на базе веб-технологий;
- разработка и конструирование опытных образцов экспериментальных приборов, устройств и детекторов излучений на базе внедрения современных передовых технологий обработки материалов.

ПОМОЩНИК ОПЕРАТОРА (SHIFTER ASSISTANT)

Программный комплекс обрабатывает в реальном времени данные операционного мониторинга сбора данных эксперимента ATLAS в ЦЕРН, поступающие с частотой ~ 200 кГц (на пике).

Это расширяемая и наполняемая система применения операционных правил, которая определяет ошибочные состояния компонентов систем, тенденции к их развитию, может предупреждать появление и диагностировать причины сбоев, предлагает действия для восстановления работоспособности, позволяет коррелировать различные события, оценивает работоспособность и состояние всей системы в целом, осуществляет мониторинг трендов всех параметров.



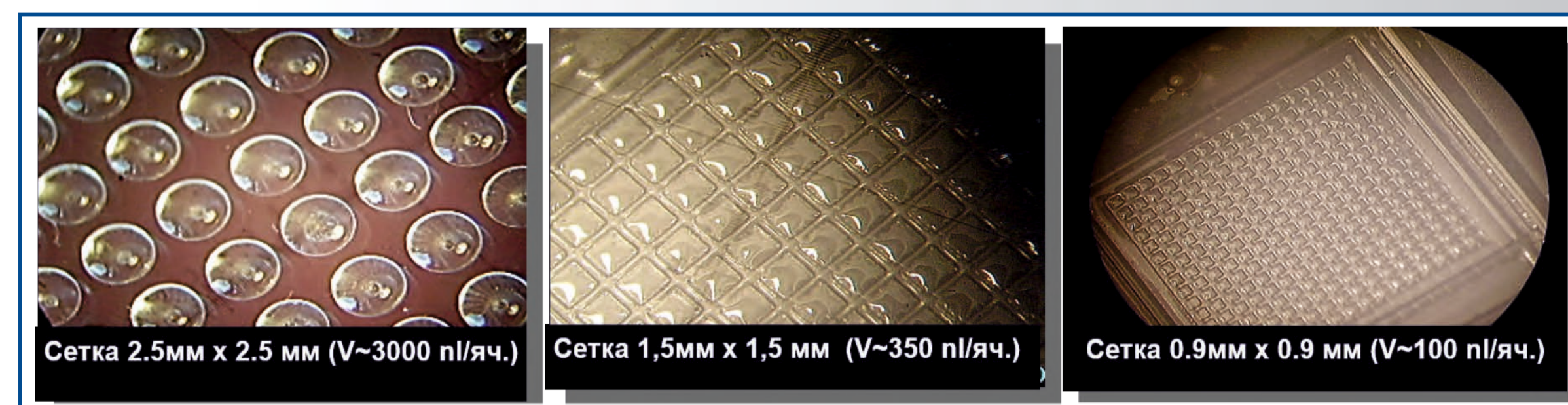
Окно веб-приложения Shifter Assistant с примерами сообщений

Комплекс был задействован на каждом рабочем месте в зале управления ATLAS (Run Control, Trigger, Data Quality, Muons, Inner Detector, Calo, Shift Leader) и позволил добиться высокой эффективности сбора данных, значительно снизив нагрузку на экспертов и операторов.

РАЗРАБОТКА ПЛАТФОРМ DMA (DROPLET MICROARRAY)

Создание платформ DMA – путь от пробирки к множеству нанопробирок (микрокапель), зафиксированных в строгом порядке на твердом основании. Платформы при встречном контакте обеспечивают слияние и смешивание капель, что позволяет одновременно проводить реакции во множестве изолированных микрореакторов.

Работы проводятся совместно с ОМПБ и лабораторией онкоэндокринологии НМИЦ онкологии им. Н. Н. Петрова.



Сетка 2.5мм x 2.5 мм (V~3000 пл/яч.) Сетка 1.5мм x 1.5 мм (V~350 пл/яч.) Сетка 0.9мм x 0.9 мм (V~100 пл/яч.)

Платформа DMA – перспективный прибор для научных исследований в области онкологии, позволяющий изолированно культивировать до 100–500 клеток в каждой ячейке, что требует минимального количества реагентов для анализа.

Метод микроформатного мультиплексного тестирования лекарственной чувствительности культур опухолевых клеток может быть использован также для решения задач «большой фармакологии» (скрининга препаратов и лекарств).

ЛАБОРАТОРИЯ ХИМИИ И СПЕКТРОСКОПИИ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ



Лаборатория химии и спектроскопии углеродных материалов (ЛХСУМ) была образована в 2018 г. (с 1989 г. – Лаборатория химии и спектроскопии материалов (ЛХСМ)).

К научно-практическим задачам ЛХСУМ относятся:

- разработка и усовершенствование технологий сублиминационного излучения фуллеренов и эндофуллеренов, исследование их физических свойств;
- модификация полимерных материалов производными фуллеренов;
- производительное получение углеродных структур из отходов гальванических производств;

- получение новых производных эндофуллеренов как основы радиофармпрепаратов, био-сенсоров и систем адресной доставки лекарств к очагу заболевания;
- исследование радиационной стойкости эндометаллофуллеренов и их производных при облучении.

Инновационные материалы ЛХСУМ

№ п/п	Наименование	Степень очистки	Степень реализации
1	C_{60}	особо чистый	Патент РФ на изобретение № 2456233 (2010)
2	C_{70}	особо чистый	Патент РФ на изобретение № 2455230 (2010)
3	$C_{84}O$	95%	Патент РФ на изобретение № 2626635 (2016)
4	Высшие фуллерены (C_{70} , C_{76} , C_{84} и др.)	≥ 95%	Препаративная жидкостная хроматография
5	$C_{60}(OH)_2$	особо чистый	Патент РФ на изобретение № 2558121 (2014)
6	$C_{60}(OH)_2$	особо чистый	
7	Высшие фуллеренолы	≥ 95%	Патенты РФ на изобретение № 2659972 (2016), № 2664133 (2017)
8	$C_{60}O(OH)_2$	95%	
9	Эндоэдральные фуллеренолы $Me@C_{60}(OH)_{24}$, $Me = Gd, Tb, Pr, Sc, Ho, Dy, Sm, Tm, Eu, Fe, Ni, Co, Mn, Mo$	50–95%	Разработана лабораторная процедура
10	Экзокомплексы C_{60} с биосовместимыми полимерами (поливинилпирролидон, декстрин и др.)	≥ 95%	
11	Экзокомплексы эндоэдральных фуллеренов с биосовместимыми полимерами (поливинилпирролидон, декстрин и др.)	50–95%	Разработана лабораторная процедура
12	Экзокомплексы эндоэдральных фуллеренов с биосовместимыми полимерами (поливинилпирролидон, декстрин и др.) и витаминами	50–95%	
13	Менее эндоэдральные фуллеренолы $Me@C_{60}(OH)_{24}$, $Me = Gd, Tb, Pr, Sc, Ho, Dy, Sm, Tm, Eu, Fe, Ni, Co, Mn, Mo$	50–95%	Патенты РФ на изобретение № 2659972 (2016), № 2664133 (2017) + протонное или нейтронное облучение