

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(государственный университет)»

Труды

61-й Всероссийской научной конференции МФТИ

19–25 ноября 2018

**Нано-, био-, информационные,
когнитивные и социогуманитарные науки
и технологии**

Москва - Долгопрудный - Жуковский

МФТИ

2018

УДК 004.81:004.9:3

ББК 32.813

T78

Труды 61-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 19–25 ноября 2018 года. Нано-, био-, информационные, когнитивные и социогуманитарные науки и технологии. — М.: МФТИ, 2018. – 70 с.

T78

ISBN 978-5-7417-0691-6

Включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников МФТИ и дружественных учебных и научных организаций. Статьи представляют интерес для специалистов, работающих в области нано-, био-, информационных, когнитивных и социогуманитарных наук и технологий.

УДК 004.81:004.9:3

ББК 32.813

ISBN 978-5-7417-0691-6

© Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)», 2018

Оглавление

Программный комитет конференции	6
Организационный комитет конференции	7
СЕКЦИЯ ИНФОРМАТИКИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СЕТЕЙ	8
Разработка системы классификации заявок о компьютерных инцидентах, используя алгоритмы машинного обучения	8
Роботизированная платформа для создания фотоизображений объектов культурного наследия ..	9
Метод оценки размеров частиц по дифракционным изображениям, полученным в экспериментах на лазерах на свободных электронах, при условии недостающих данных	12
Исследование влияния количества доступной информации на достижимое разрешение при определении пространственной структуры в экспериментах на лазерах на свободных электронах.....	13
СЕКЦИЯ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ФИЗИКИ	16
Асимптотика спектральных зон двумерного оператора Шредингера с периодическим потенциалом с двумя глобальными минимумами на ячейке	16
Локализованное асимптотическое решение волнового уравнения с радиально-симметричной скоростью на простейшем декорированном графе с произвольными граничными условиями в точке склейки.....	17
Асимптотические решения задачи Коши линеаризованной системы уравнений газовой динамики с быстро осциллирующими начальными условиями	17
Асимптотика решения явной разностной схемы для волнового уравнения	18
Распространение импульсных акустических сигналов в трехмерном клине	18
Подбор параметров метода осреднения в задаче о распространении волн цунами	19
Асимптотики решения волнового уравнения с вырождающейся скоростью и задача о набеге длинных волн на берег.....	20
Моделирование структуры и электропроводности кластера биметаллической фрактальной нанопленки.....	21
Волны на поверхности жидкости, создаваемые движущимися источниками.	23
СЕКЦИЯ НБИК-ТЕХНОЛОГИЙ	24
Исследование влияния способа эксфолиации β -хитина на механические свойства композитов на основе полиакриловой кислоты	24
Трехмерный анализ изменений пролиферативной активности клеток под действием мемантина в мозге взрослой мыши	25
Изучение нейроморфных систем на основе нанокompозитных мемристоров	27
Применение гидрогелей на электродах для изучения ферментных биотопливных элементов на основе <i>Glucose Oxidase</i>	28
Исследование воздействия космического излучения на фототрофные микроорганизмы	28
Исследование физической адсорбции полярных молекул $C_{60}F_{18}$ на высокоориентированном пиролитическом графите	29
Влияние pH на скорость фотоциклических переходов в фотоактивном оранжевом каротиноидном белке.....	30
Направленный мутагенез тиоцианатдегидрогеназы из <i>Thioalkalivibrio Paradoxus</i> для предотвращения тетрамеризации при кристаллизации.	32

Анализ концентрации хлорофилла <i>a</i> в крупнейших водоёмах с помощью методов машинного обучения.....	32
Исследование процессов биокристаллизации для защиты генетического материала с помощью криоэлектронной томографии.....	33
Моделирование активности дофаминового сигнального пути с помощью методов системной биологии.....	33
Изучение свойств мемристовых структур на основе оксидов металлов, содержащих металлические наночастицы	34
Исследование возможности получения медицинских изотопов Tb облучением Eu-мишени α -излучением.....	35
Задача локализации моторных функций в коре головного мозга с применением метода независимых компонент для устранения артефактов.....	35
Исследование циклической биомеханики модифицированных децеллюляризованных тканей	37
Использование нейросетевых алгоритмов для решения задачи генерации лемм	38
Анализ текущих методов для решения задач эмотивно-тональной оценки текстов.....	40
Поиск психофизиологических коррелятов агентивности в активно-пассивной парадигме	42
Получение волокнистых материалов на основе коллагена методом электроформования	44
Коагулятор с вращающейся электроискровой дугой.....	45
Обнаружение прогностических геномных маркеров неходжкинских лимфом.....	46
Об идентификации типа возбудимости нейрона по отклику на импульсную стимуляцию	47
Применение методов компьютерного моделирования для оценки аффинности связывания производных тразола в активном центре имидазол глицерофосфат дегидратазы.....	48
Применение молекулярного докинга для построения моделей комплексов имидазол глицерофосфат дегидратазы с рядом производных тразола	49
Поиск новых ингибиторов имидазол глицерофосфат дегидратазы с использованием виртуального скрининга	49
Исследование природы и свойств дефектов в нитриде титана, полученного с помощью аддитивных технологий.....	50
Влияние отжига на структуру и оптические свойства композитов на основе поли-пара-ксилилена и сульфида свинца	51
Синтез, структура и электрофизические свойства нанокompозитов поли-п-ксилилен – серебро.....	52
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ И ФИЗИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ	54
Моделирование влияния облучения высокоэнергетическими нейтронами и гамма-квантами на характеристики МОП-транзистора.....	54
Спектры и кинетика фотолуминесценции квантовых точек селенида кадмия, внедренных в жидкокристаллическую полимерную матрицу	56
Возможности измерения нейтринной силы отдачи с помощью микромеханических резонаторов.....	58
Изменение свойств перовскита $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_{3-x}$ в тонких пленках.....	59
Влияние процессов образования пространственного заряда на электрофизические свойства монокристалла алмаза.....	60
Халькогениды висмута и сурьмы: особенности распределения зарядовой плотности, необычные магнитные свойства и сверхпроводимость.....	60
Изменение эффективности комбинационного рассеяния света в диметилсульфоксиде, вызванное упругим рассеянием света на частицах порошков рутила и фосфида галлия.....	61

Применение ВТСП проводов для сверхпроводниковой системы магнитной холодильной машины	63
Теплопроводность тонкопленочных структур $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{AlGaN}$	65
Распад сплава Al-Cu и формирование зон Гинье-Престона на основе кинетической теории с первопринципной параметризацией.....	65
Автомодельное решение задачи супердиффузионного переноса для конечной скорости переносчиков	66

Программный комитет конференции

Н.Н. Кудрявцев, ректор МФТИ – председатель

*В.А. Баган, проректор по научной работе и программам развития – заместитель
председателя*

А.А. Воронов, проректор по учебной работе и довузовской подготовке

А.В. Дворкович, директор ФРКТ

В.В. Киселев, директор ФФПФ

С.С. Негодяев, директор ФАКТ

В.В. Иванов, директор ФЭФМ

А.М. Райгородский, директор ФПМИ

В.Б. Назаров, директор ФБМФ

П.К. Кашкаров, директор ИНБИКСТ

Организационный комитет конференции

М.В. Милов, руководитель направления «Образование» ЦУП – председатель

С.О. Русскин, представитель ФРКТ

Е.Ю. Чиркина, представитель ФФПФ

Ю.О. Алексеева, представитель ФАКТ

В.Б. Макарова, представитель ФАКТ

В.А. Яворский, представитель ФЭФМ

С.А. Зайцев, представитель ФЭФМ

Е.Г. Молчанов, представитель ФПМИ

В.Н. Логинов, представитель ФПМИ

К.А. Коньков, представитель ФПМИ

А.Ю. Беловолов, представитель ФБМФ

В.Г. Орлов, представитель ИНБИКСТ

М.В. Костелева, представитель УНЦ ГСН

А.С. Гунаисова, начальник пресс-службы

Е.Д. Жебрак, директор аналитического центра

СЕКЦИЯ ИНФОРМАТИКИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СЕТЕЙ

Председатель: В.А. Ильин
Зам. председателя: Ю.А. Семенов
Секретарь: В.А. Федотов

Дата: 20.11.2018

Время: 15:40

Место: Москва, ул. Максимова, д. 4, ауд.
27

УДК 004.855.5

Разработка системы классификации заявок о компьютерных инцидентах, используя алгоритмы машинного обучения

А.О. Гладких

Московский физико-технический институт (государственный университет)

За последнее время роль Интернета в повседневной жизни увеличилась. Это и интернет-банки, и социальные сети, интернет-магазины, гос услуги. Тем не менее, интернет-грамотность пользователей ещё не так высока, чем умело пользуются злоумышленники, создавая фишинг(phishing)-сайты — поддельные страницы известных банков, социальных сетей, зайдя на которые, пользователь может ошибочно отправить злоумышленникам важные данные. Одновременно с этим не теряют популярности хакерские атаки - злонамеренные действия, цель которых – похищение информации, установление контроля над удаленной системой (компьютером) или выведение систем и компьютеров из строя.

Целью хакеров становятся преимущественно банки и гос структуры. Своевременное обнаружение вредоносного программного обеспечения (malware) может предупредить атаки и серьезные проблемы для компаний, в которых оно было внедрено.

С целью предупреждения атак, сбора информации о фишинговых сайтах и вредоносном ПО, была создана АСОИ – Автоматизированная Система Обработки Инцидентов. Инцидент – событие, прерывающее или нарушающее функционирование объекта информационной структуры. На вход системы приходит электронная почта трех типов – фишинг, атаки, malware. Остальные письма относятся к отдельной категории – спам/иное. Письма из первых трех категорий можно назвать «сообщениями о компьютерных инцидентах». Система может попытаться сама по ключевым словам проанализировать письмо и определить его категорию, но такой способ является очень неточным. Поэтому, разбор сообщений занимается человек, который, прочитав письмо, определяет его категорию и извлекает нужную информацию из письма (ссылка на вредоносный сайт, лог атаки, ссылка на вредоносное ПО). Ежедневно приходит около 100 писем, разбор которых может занимать несколько часов и требует человеческого участия.

В данной работе описан процесс разработки интеллектуальной системы, занимающейся классификацией[1] и анализом e-mail сообщений о компьютерных инцидентах и автоматизирующей работу оператора АСОИ. ПО выполнено на языке программирования Python.

В модуле классификатора сообщений была произведена подготовка данных для классификации и анализ существующих алгоритмов машинного обучения для классификации текста и выбран наиболее эффективный из них для данной задачи. Алгоритмы - мультиномиальный байесовский классификатор (Multinomial Naive Bayes), метод опорных векторов (Support Vector Machine, SVM) и библиотека XGBoost. Критериями эффективности были наибольшая F-мера[2] на

самом малочисленном классе и быстрота обучения модели. По итогам исследования наиболее оптимальным вариантом стал метод опорных векторов. [3]

Для обучения использовались 5424 e-mail сообщения четырех типов - спам/другое, фишинг, вредоносное ПО и атаки. Они были отфильтрованы от лишних символов, были выделены отдельно тема, текст письма и автор сообщения, удалены стоп-слова, текст был разбит на токены. Из токенов с помощью TF-IDF[4] векторизации была создана матрица фич для обучения.

По итогам обучения модель показала точность 98%.

В модуле для первичного анализа сообщений используется определение именованных сущностей (Name-Entity Recognition, NER)[5], регулярные выражения, анализ по шаблону. С их помощью из писем типа «фишинг» удастся извлечь автора, фишинговую ссылку, ресурс, на который была совершена атака и ссылку на этот ресурс, что облегчает работу по прочтению письма.

В дальнейшем планируется улучшить модуль для анализа письма, модель классификатора сделать автоматически переобучающейся на новых данных и протестировать модули на АСОИ в течение длительного времени.

Литература

1. S. B. Kotsiantis, "Supervised Machine Learning: A Review of Classification Techniques," *Informatica*, vol. 31, pp. 249–268, 2007.
2. M. Hossin and M. N. Sulaiman, "A REVIEW ON EVALUATION METRICS FOR DATA CLASSIFICATION EVALUATIONS," *Int. J. Data Min. Knowl. Manag. Process.*, vol. 5, no. 2, 2015.
3. A. Ben-Hur and J. Weston, "A User's Guide to Support Vector Machines."
4. © E Garcia and A. Co, "The Classic TF-IDF Vector Space Model," 2006.
5. V. Krishnan and V. Ganapathy, "Named Entity Recognition," 2005.

УДК 771.4

Роботизированная платформа для создания фотоизображений объектов культурного наследия

Н.П.Казанцева¹, М.Н. Жижин³, А.А. Пойда², А.В. Андреев³, В.А. Ильин², А.В. Говоров³

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»

³Институт космических исследований РАН

Сохранение объектов культурного наследия – обширное и важное направление деятельности, отраженное в законодательстве РФ и включающее (согласно п. 1 в ред. Федерального закона от 22.10.2014 N 315-ФЗ) «меры, направленные на обеспечение физической сохранности и сохранение историко-культурной ценности объекта культурного наследия, предусматривающие консервацию, ремонт, реставрацию, приспособление объекта культурного наследия для современного использования и включающие в себя научно-исследовательские, изыскательские, проектные и производственные работы, научное руководство проведением работ по сохранению объекта культурного наследия, технический и авторский надзор за проведением этих работ». Одной из важных составляющих данных мер является фотографическое документирование (фотофиксация) состояния объектов культурного наследия, которое может впоследствии использоваться как для отслеживания изменения состояния объекта, так и в ходе реставрационных работах. В настоящее время модульной единицей измерения для аналитической работы реставратора является макроплощадка красочного слоя в 1 кв.см, поэтому фотографии объекта должны быть в высоком разрешении. В то же время общая площадь объекта может достигать десятков и сотен квадратных метров.

В 2016 г. при финансовой поддержке РФФИ начат проект «Многозональная вычислительная фотография для мониторинга состояния сохранности монументальной живописи старых мастеров», одной из целей которого является автоматизация сбора мозаичных макрофрагментов трехмерной поверхности живописи.

В ходе работы над проектом была создана уникальная бюджетная роботизированная планарная платформа (рисунок 1), позволяющая осуществить панорамную съемку поверхности с расстояния в десятки сантиметров на поверхности в десятки квадратных метров в масштабе 1:1 с разрешением порядка 10 мкм на пиксель.



Рис.1. Роботизированная платформа для цифровой фотосъемки произведений монументальной живописи

Технические параметры платформы:

- для перемещения движущейся головки с закрепленным на ней фотоаппаратом вдоль осей используются шаговые двигатели FL 42STH47;
- для организации движения движущей головки вдоль осей используется плата Arduino с установленным на ней программным обеспечением на основе библиотеки с открытым кодом Grbl v0.9.j;
- для создания фотоизображений используется зеркальная цифровая фотокамера Canon 5D Mark II.

В силу уникальности разработанной платформы, потребовалось разработать и реализовать программное обеспечение, обеспечивающее функционал для управления платформой, а также предоставляющее пользователю графический интерфейс для взаимодействия с ней. Для разработки программы использовался язык программирования Python версии 2.7; для разработки графического интерфейса - фреймворк PyQt4; для взаимодействия с шаговыми двигателями – язык программирования устройств с числовым программным управлением (ЧПУ) «G-код»; для взаимодействия с фотокамерой – профессиональное программное обеспечение для удаленного управления цифровой зеркальной камерой Canon «DSLR Remote Pro».

Разработанное программное обеспечение позволяет:

- осуществление свободного движения крепежной головки с камерой вдоль горизонтальных и вертикальных направляющих;
- создание единичного снимка и его сохранение на компьютер оператора;
- поддержку координатной сетки, покрывающей рабочее пространство платформы (координаты позволяют позиционировать камеру и вычислять расстояния между точками съемки);
- поддержку серийной фотосъемки в соответствии с заданным пользователем маршрутом движения камеры;
- интерактивный вывод информации о полученных фотоснимках и их координатах, а также о снимках, которые не были сделаны, и причинах, по которым они не были сделаны.

На рисунках 2-3 представлены скриншоты графического интерфейса пользователя.

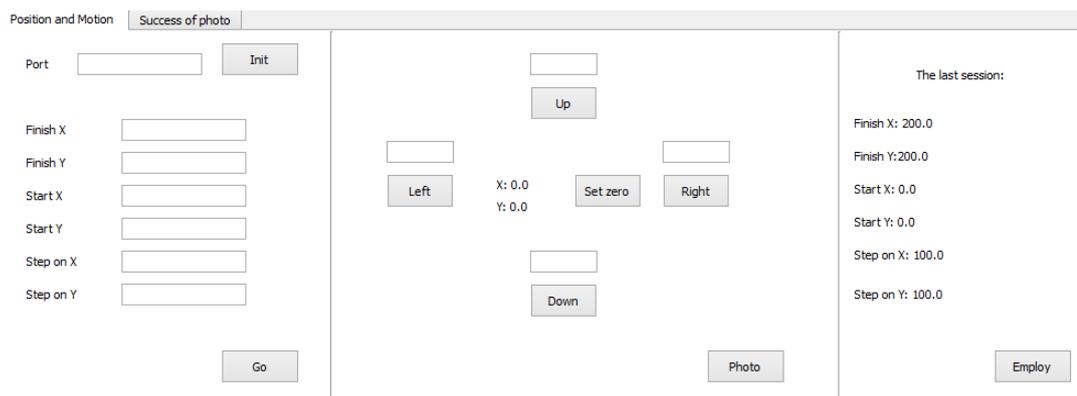


Рис.2. Графический интерфейс пользователя. Окно управления

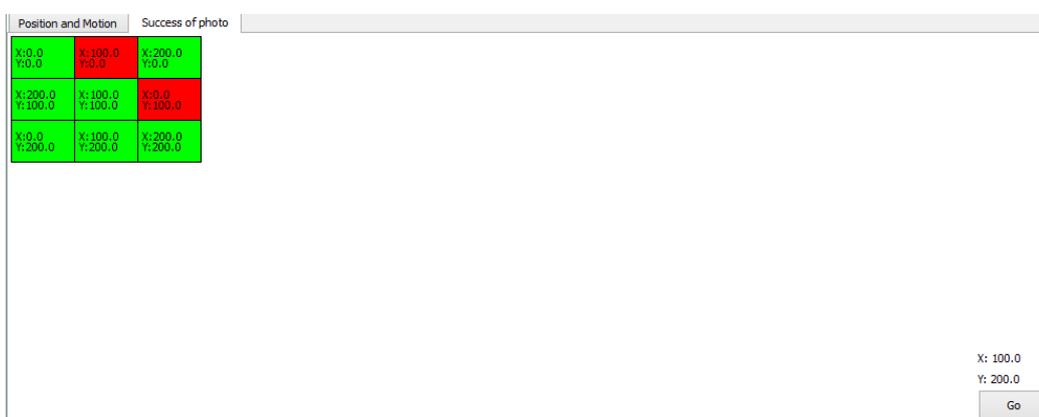


Рис.3. Графический интерфейс пользователя. Информация о сделанных снимках

Апробация разработанной аппаратной платформы и программного обеспечения была проведена на фресках Дионисия в Ферапонтовом монастыре Рождества Богородицы.

При помощи разработанной платформы была проведена съемка композиции фрески «Пятый Вселенский собор». В общей сложности было выполнено 722 снимка, каждый покрывающий площадь размера 300x200мм, вместе покрывшие площадь порядка 4 м². Полученные снимки вместе с метаданными были загружены в базу данных и склеены в единую панорамную композицию, имеющую размер 47780x49537 пикселей, при помощи программы Agisoft PhotoScan. На рисунке 4 представлен скриншот композиции «Пятый Вселенский собор».

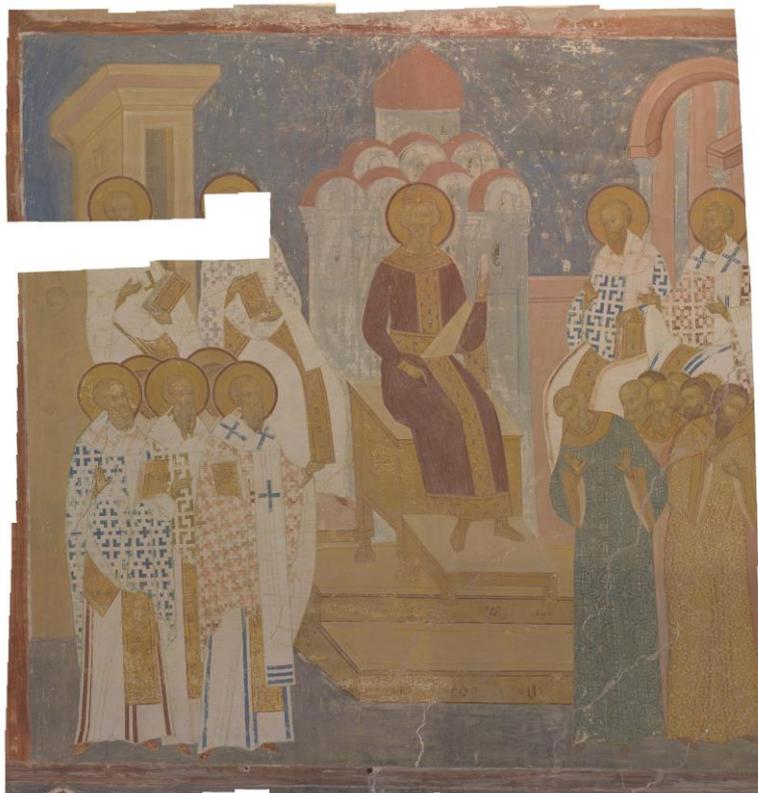


Рис.4. Пятый Вселенский Собор

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №. 16-07-01177 «Многозональная вычислительная фотография для мониторинга состояния сохранности монументальной живописи старых мастеров».

Литература

1. ГОСТ 27471-87 "Машины электрические вращающиеся. Термины и определения". - (рус.) - 1988 г..
2. Инженерные решения. [В Интернете] // Веб-сайт. Инженерные решения. Шаговый двигатель. - (рус) - 2012 г.. - <http://engineering-solutions.ru/motorcontrol/stepper/#1>.
3. Программирование Arduino [В Интернете] // Веб-сайт arduino.ua. - (рус) - 2018 г.. - <https://doc.arduino.ua>.
4. Официальный репозиторий проекта Grbl [В Интернете] // Ссылка на репозиторий проекта Grbl. - (англ.) - 2009 г.. - <https://github.com/grbl/grbl>.
5. ГОСТ 20999-83 "Устройства числового программного управления". - (рус.) - 1983 г..
6. Библиотека PyQt [В Интернете] // Официальный сайт PyQt. - (англ.) - 2018 г.. - <https://www.riverbankcomputing.com/software/pyqt/download>.
7. Программа для фотограмметрической обработки цифровых изображений. Agisoft PhotoScan [В Интернете] // Веб-сайт проекта Agisoft PhotoScan. - (рус) - 2018 г.. - <https://www.geoscan.aero/ru/software/photoscan>

УДК 004.932

Метод оценки размеров частиц по дифракционным изображениям, полученным в экспериментах на лазерах на свободных электронах, при условии недостающих данных

С.И. Золотарев

Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"

Когерентная дифракционная рентгеновская микроскопия - это перспективный метод изучения трехмерной структуры наноразмерных объектов, таких как белки или вирусы.

Использование этого метода для изучения отдельных частиц стало возможно только в последнее десятилетие, в связи с появлением источников рентгеновского излучения четвертого поколения - рентгеновских лазеров на свободных электронах. Результатом таких экспериментов является огромный массив двумерных дифракционных изображений, а конечной их целью - единственное трехмерное изображение исследуемой частицы.

В данной работе разработаны методы обработки таких данных. В частности, рассматриваются три основные задачи: поиск центра неполной дифракционной картины, оценка размера частицы и использование этого размера для предварительной фильтрации изображений. Отличительной особенностью разработанных методов является их применимость к низкокачественным и/или неполным данным.

Для нахождения центра, изображения преобразуются в их радиальный интеграл, который используется для построения упрощенного модельного дифракционного изображения. После этого модель и оригинал выравниваются методом максимизации их кросс-корреляции.

Для оценки размера частицы, изображения опять же интегрировались по углу (с использованием найденного ранее центра), и полученная таким образом функция приближалась форм-фактором твердой сферы. Ввиду низкого качества данных, при регрессии были использованы не все значения этой функции а только положения ее максимумов.

Полученный таким образом размер частицы, позволяет провести предварительную фильтрацию дифракционных изображений, необходимую для дальнейшей обработки таких данных. Для этого использовалось априорное знание размера исследуемой частицы, что позволяет отличить дифракционные изображения, полученные при рассеянии на одной изучаемой частицы, от изображений примесей или нескольких частиц.

Разработанные методы были применены к данным эксперимента "European XFEL proposal 002013", который был первым экспериментом, проведенным на European XFEL. Изображения, полученные в этом эксперименте, имеют низкую яркость и большие недостающие регионы, что делает множество стандартных методов анализа не применимыми. С помощью созданных в ходе данной работы методов, нам удалось восстановить центр дифракционных изображений с точностью до 1 пикселя детектора (200 мкм). Процедура фильтрации изображений по размеру частицы, имеет точность до 90% при полноте около 20%.

УДК 004.932

Исследование влияния количества доступной информации на достижимое разрешение при определении пространственной структуры в экспериментах на лазерах на свободных электронах

К.А. Иконникова

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Используя эксперименты по рассеянию рентгеновского излучения на свободных электронах, можно изучать биомолекулы, которые трудно кристаллизовать, в условиях, близких к их естественному состоянию. Однако получение пространственной структуры высокого разрешения из данных эксперимента на лазерах на свободных электронах не лишено проблем - для получения достаточного дифракционного сигнала требуется высокая интенсивность пучка, а настройка экспериментального оборудования и подготовка биологических образцов остаются сложными задачами, приводящими к ограниченному числу качественных дифракционных изображений. Для того, чтобы определить как количество и качество, получаемых в ходе эксперимента данных, влияет на разрешение была проведена реконструкция структуры биомолекулы Keyhole limpet hemocyanin - KLH1 из модельных дифракционных изображений, сгенерированных с разными экспериментальными параметрами. Было создано 14 наборов модельных дифракционных изображений и исследование проводилось для двух параметров: количества дифракционных изображений и интенсивности пучка излучения.

Для оценки разрешения восстановленных из дифракционных изображений трехмерных структур использовался метод объемной корреляции Фурье (Fourier shell correlation - FSC) [1], где коэффициент объемной корреляции Фурье измеряет нормированный коэффициент взаимной корреляции между реконструированной трехмерной электронной плотностью и модельной

трехмерной электронной плотностью по соответствующим оболочкам q_i в пространстве Фурье и представляет собой функцию от пространственной частоты q :

$$FSC(q_i) = \frac{\sum_{q \in q_i} \tilde{F}_{restore}(q) \cdot \tilde{F}_{model}(q)^*}{\sqrt{\sum_{q \in q_i} \tilde{F}_{restore}(q)^2 \cdot \sum_{q \in q_i} \tilde{F}_{model}(q)^2}},$$

где $\tilde{F}_{restore}(q)$ - это комплексный структурный фактор для реконструированной трехмерной электронной плотности в положении q в пространстве Фурье, $\tilde{F}_{model}(q)^*$ - это комплексный сопряженный структурный фактор для модельной трехмерной электронной плотности, q - это индивидуальный воксельный элемент на радиусе q_i . Суммирование ведется по всем воксельным элементам q в пространстве Фурье, которые содержатся в оболочке q_i . В качестве порога был выбрана функция 1/2 - битового порога $T_{1/2-bit}(q_i)$, которая определяется следующим образом:

$$T_{1/2-bit}(q_i) = \frac{0.2071 + 1.9102 \cdot 1/\sqrt{n_e(q_i)}}{1.2071 + 0.9192 \cdot 1/\sqrt{n_e(q_i)}},$$

где $n_e(q_i)$ представляет собой количество «эффективных» вокселей, при вычислении которого учитывается влияние симметрии объекта и линейного размера D молекулы относительно линейного размера трехмерного объема L . На Рисунке 1 представлены результаты реконструкции для разного количества изображений, а на Рисунке 2 для разной интенсивности пучка.

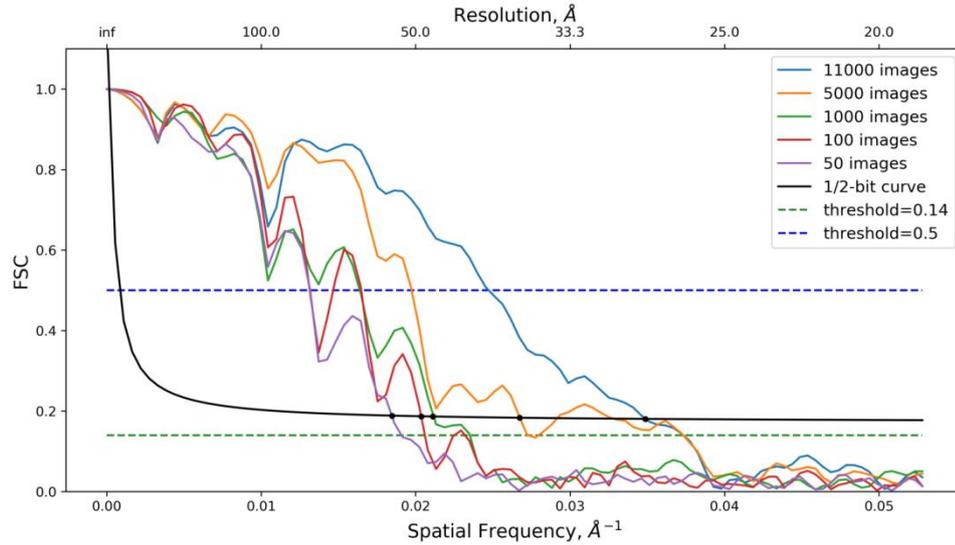


Рис.1.

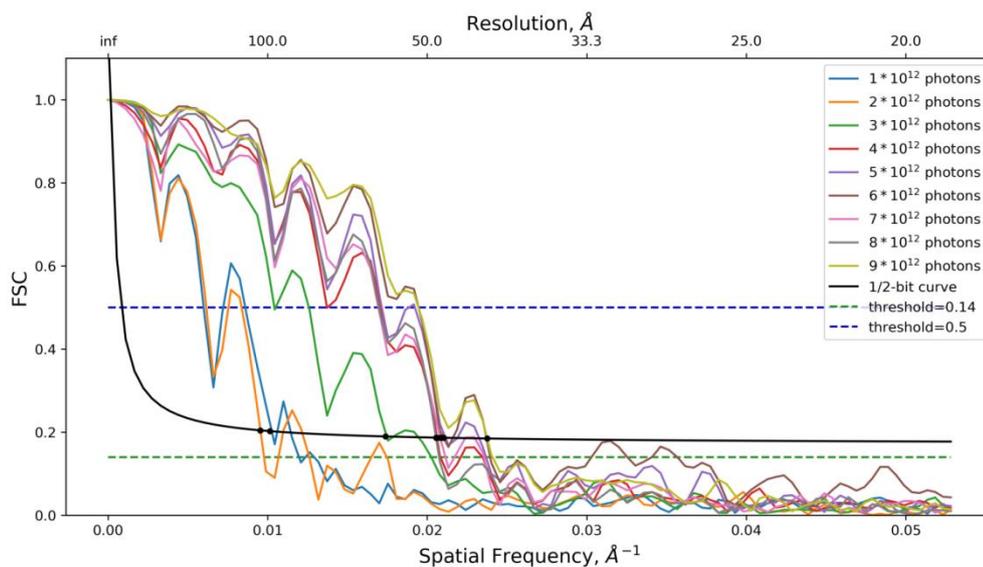


Рис.2.

Таким образом было получено, что экспериментальные условия, необходимые для получения разрешения менее 3 нм для восстановленной молекулярной структуры следующие: требуется более 11000 дифракционных изображений, созданных с использованием интенсивности пучка свыше 10^{13} фотонов/мкм².

Литература

1. Marin Van Heel and Michael Schatz. Fourier shell correlation threshold criteria. In: Journal of Structural Biology 151.3 (2005), pp. 250–262.

СЕКЦИЯ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ФИЗИКИ

Председатель: С.Ю.Доброхотов
Зам. председателя: А.И. Шафаревич
Секретарь: А.Ю. Аникин

Дата: 19.11.2018

Время: 15:40

Место: Москва, ул. Максимова, д. 4, ауд.
27

УДК 517.955.8

Асимптотика спектральных зон двумерного оператора Шредингера с периодическим потенциалом с двумя глобальными минимумами на ячейке

А.Ю. Аникин^{1,2}, М.А. Вавилова²

¹Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

²Московский физико-технический институт (Государственный университет)

В настоящей работе исследуется структура нижних зон спектра оператора Шредингера с периодическим потенциалом, имеющим два глобальных минимума на элементарной ячейке, в квазиклассическом приближении. Этот потенциал представляет физический интерес в приложении к задаче о вращающихся димерах. Однако задача о димерах существенно сложнее, т.к. имеет четыре степени свободы, поэтому как подготовка к ней будет рассмотрена задача для одной частицы.

Мы интересуемся нижними спектральными зонами (т.е. где работает осцилляторное приближение), ширина которых экспоненциально мала. Такого типа асимптотики называются туннельными. Простейшая задача, в которой они возникают, — симметричная двойная яма. В ней работает метод Ландау-Лифшица, основанный на интегрировании по полупространству. В более сложных ситуациях (например, когда ям больше, чем две) этот метод уже не применим. Поэтому мы используем более общую теорию Элффера-Сестранда, которая сводит исходную «непрерывную» задачу к случаю многоямного потенциала и позволяет свести вопрос к нахождению собственных значений некоторой матрицы.

Для рассмотренного случая были получены дисперсионные соотношения - зависимости энергии от квазиимпульса. Причем туннельные эффекты описаны с экспоненциально малой погрешностью, где в степени экспоненты стоит действие на инстантоне — двоякоасимптотической траектории классической системы с перевернутым потенциалом, соединяющей точки, отвечающие глобальным минимумах исходного потенциала. Для нас будет иметь значение только инстантон с минимальным действием.

Как будет показано, именно количество ям на ячейке и обусловленные симметриями потенциала «взаимодействия» между ними и определяют асимптотику дисперсионных соотношений. Поэтому использованный в данной работе метод может быть применим ко многим другим потенциалам.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-31-00273.

УДК 517.955.8

Локализованное асимптотическое решение волнового уравнения с радиально-симметричной скоростью на простейшем декорированном графе с произвольными граничными условиями в точке склейки

А.В. Цветкова

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Задача о нахождении локализованных асимптотических решений гиперболических уравнений достаточно хорошо изучена. В частности, существует теория канонического оператора Маслова (см. [1]), позволяющая строить главную часть асимптотики. Однако, младшие члены асимптотики каноническим оператором не описываются. Интерес представляет изучение точных и асимптотических решений дифференциальных уравнений на декорированных графах, т. е. объектах, полученных из плоских графов заменой вершин на многообразия [2].

Настоящая работа посвящена описанию асимптотического решения волнового уравнения с переменной скоростью на простейшем декорированном графе, полученном приклеиванием луча к трехмерному евклидовому пространству. Рассматривается задача Коши с локализованными условиями на луче. Дифференциальный оператор на декорированных графах определяется, исходя из двух требований: 1. он должен быть самосопряженным; 2. ограничение этого оператора на каждую составляющую декорированного графа дает обычный соответствующий оператор на данном многообразии. Чтобы оператор был самосопряженным, необходимо задать граничные условия в точке склейки, которые определяются с помощью унитарной матрицы.

В настоящей работе получен полный асимптотический ряд для решения такой задачи Коши (в том числе и младшие члены асимптотики) при произвольных граничных условиях в точке склейки, т.е. для любой унитарной матрицы. При этом предполагается, что скорость на евклидовом пространстве радиально симметрична. Также обсуждается вопрос о распределении энергии при стремлении малого параметра к нулю.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 18-31-00273).

Литература

1. Маслов В.П., Федорюк М.В. Логарифмическая асимптотика быстроубывающих решений гиперболических по Петровскому уравнений // Мат. заметки. 1989. Т. 45, № 5. С. 50-62.
2. Павлов Б.С., Фаддеев М.Д. Модель свободных электронов и задача рассеяния // ТМФ. 1983. Т. 55, № 2. С. 257-268.

УДК 533.17

Асимптотические решения задачи Коши линеаризованной системы уравнений газовой динамики с быстро осциллирующими начальными условиями

А.И. Аллилуева¹, А.И. Шафаревич^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²МГУ им. М.В. Ломоносова

Линеаризованные уравнения газовой динамики описывают эволюцию малых возмущений поля скоростей и плотности газа; исследованию такой эволюции в разных ситуациях посвящена обширная литература. При описании асимптотик решений этих уравнений для быстро осциллирующих начальных условий возникают эффекты, связанные со сменой кратности характеристик, которая в данном случае является весьма специфичной (не выполнены стандартные условия общего положения). В результате чего возникают три моды: гидродинамическая и две акустические. Решения также состоят из трех частей для различных мод.

В работе описаны решения с быстро осциллирующими начальными условиями, рассмотрены некоторые примеры, когда решения растут линейно и экспоненциально со временем, также описаны оценки для разрешающего оператора.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 18-31-00273).

УДК 517.958

Асимптотика решения явной разностной схемы для волнового уравнения

С.А. Сергеев

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва
Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный

Для задачи Коши для одномерного волнового уравнения с локализованными начальными данными и переменным коэффициентом строится явная разностная схема. Эту схему можно переписать в виде псевдодифференциального уравнения и применить к нему теорию В.П. Маслова построения асимптотического решения.

В зависимости от соотношения малого параметра локализации начальной функции и шага сетки асимптотическое решение будет различным.

Работа поддержана грантом РФФИ 16-11-10282.

Литература

1. *Доброхотов С.Ю., Назайкинский В.Е.* Проколотые лагранжевы многообразия и асимптотические решения линейных уравнений волн на воде с локализованными начальными условиями // Матем. Заметки, 2017, т. 101, вып. 6, с. 936–943
2. *Данилов В.Г., Маслов В.П.* Принцип двойственности Понтрягина для вычисления, эффекта типа Черенкова в кристаллах и разностных схемах. I // Тр. МИАН СССР, 1984, т. 166, с. 130–160
3. *Данилов В.Г., Маслов В.П.* Принцип двойственности Понтрягина для вычисления, эффекта типа Черенкова в кристаллах и разностных схемах. II // Тр. МИАН СССР, 1985, т. 167, с. 96–107
4. *Данилов В.Г., Жевандров П.Н.* О методе Маслова построения комбинированных асимптотик для h -псевдодифференциальных уравнений // Изв. АН СССР. Сер. Матем., 1989, т. 53, вып. 2, с. 411–424
5. *Маслов В.П.* Операторные методы. // Москва, Наука, 1973, 544 с.

УДК 517.958

Распространение импульсных акустических сигналов в трехмерном клине

А.А. Толченников^{1,2}, П.С. Петров³, С.А. Сергеев^{1,2}

¹Институт проблем механики РАН им. А.Ю. Ишлинского

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

³Тихоокеанский океанологический институт им. В.И. Ильичева ДОРАН

Используя подход из статей [1-2], мы строим асимптотическое решение для задачи распространения импульсных акустических сигналов в трехмерном клине. В статье [3] были представлены формулы для асимптотического решения задачи распространения импульсных сигналов в глубоком океане с непроницаемым дном. Если дно является плоским и наклонным, то, в предположении малости угла наклона, появляется эффект горизонтальной рефракции [4]. Доклад будет посвящен сравнению асимптотического решения из [3] с численным решением, полученным методом нормальных мод.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-31-00148 мол_a.

Литература

1. *Dobrokhotov S.Yu., Nazaikinskii V.E., Tirozzi B.* Asymptotic solutions of 2D wave equations with variable velocity and localized right-hand side // Russ. J. Math. Phys. 2010. V. 17. P. 66
2. *Dobrokhotov S.Yu., Minenkov D.A., Nazaikinskii V.E., Tirozzi B.* Functions of Noncommuting operators in an asymptotic problem for a 2D wave equation with variable velocity and localized right-hand side // Oper. Theory Adv. Appl. 2013. Vol. 228. P. 95.
3. *Petrov P.S., Sergeev S.A., Tolchennikov A.A.* Modeling of Pulse Signals in 3D Propagation Problems of Deep-Water Acoustics Based on the Modified Maslov's Canonical Operator // Russ. J. Math. Phys. 2018. Vol. 25. P. 102.
4. *Weston D.E.* Horizontal Refraction in a Three-dimensional Medium of Variable Stratification // Proc. Phys. Soc. 1961. V. 78. P. 46.

УДК 519.633

Подбор параметров метода осреднения в задаче о распространении волн цунами*А.Д. Кареев¹, Д.А. Караева^{1,2}*¹Московский физико-технический институт (государственный университет)²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Рассматривается задача о распространении длинных волн (для которых длина волны много больше глубины бассейна) в бассейне. При отсутствии вихревых движений в линеаризованном приближении данный процесс описывается волновым уравнением (см. [1]):

$$\eta_{tt} - (c^2(x)\eta_x)_x = 0 \quad (1)$$

на возвышение свободной поверхности η . $c^2(x) = gD(x)$, где g - ускорение свободного падения, $D(x)$ - глубина бассейна в точке x .

Поставим задачу Коши в соответствии с поршневой моделью генерации волн цунами (см. [1]), а именно

$$\eta|_{t=0} = \eta_0(x), \quad \eta|_{t=0} = 0. \quad (2)$$

Будем рассматривать распространение длинных волн в бассейне, характерные горизонтальные размеры которого значительно превышают длину волны. Тогда возникает естественный малый параметр h , характеризующий отношение длины волны к размеру бассейна. Наличие малого параметра в задаче позволяет строить асимптотические решения. Однако, если рассматривать распространение волн в реальных водоемах, например в океане, то можно заметить, что изменение дна носит следующий характер - это относительно плавное глобальное изменение, на которое наложены мелкие хаотические осцилляции, обусловленные наличием большого числа неровностей. Таким образом, задача (1), (2) содержит быстроосциллирующие коэффициенты, что препятствует построению асимптотик. Что касается численного решения, наличие частых изменений приводит к необходимости использования мелкой сетки, что делает решение неэффективным как по времени, так и по вычислительным затратам.

Для построения асимптотического решения задачу (1), (2) необходимо модифицировать с целью приведения к таким коэффициентам, изменение которых является более плавным, нежели изменение решения. Данной цели можно добиться, используя метод осреднения. А именно, будем рассматривать метод, предложенный в [2]. В первом приближении указанная методика сводится к замене в исходной задаче коэффициента на его усредненное значение:

$$\overline{c^2(x)} = g\overline{D(x)} = g \int \varphi(\xi)D(x - r\xi)d\xi, \quad (3)$$

$$\begin{cases} \int \varphi(z) = 1 \\ \int \varphi(z)z^n = 0, \quad \forall n \leq N \end{cases} \quad (4)$$

здесь r - радиус осреднения, φ - ядро усреднения порядка N .

С теоретической точки зрения, необходимо использовать ядро усреднения бесконечного порядка, а что касается радиуса r , его выбор не влияет на решение с точностью до $O(r^\infty)$. Однако при практическом применении метода данные величины необходимо подбирать вручную с целью обеспечения наилучшей согласованности решений исходного и усредненного уравнения, а также достаточной плавности коэффициентов для построения асимптотического решения.

Для определения степени рассогласованности полученных волн можно использовать следующие меры погрешности:

- оценку разности решений на основании энергетической нормы, естественной для волнового уравнения:

$$\Delta_1 = \frac{\max_t J(u_a(x,t) - u_r(x,t))}{\max_t J(u_r(x,t))}$$

$$J^2(t) = (\|u_t\|^2 + \|c\nabla u\|^2)$$

- простую оценку разности решений

$$\Delta_2 = \frac{\max_{x,t} |u_a(x,t) - u_r(x,t)|}{\max_{x,t} |u_r(x,t)|}$$

Целью данной работы было изучение влияния всех параметров метода осреднения на получаемый результат, а также подбор оптимального параметра для нескольких участков.

В качестве тестовых регионов выбирались участки дна мирового океана, на которых в последнее время были зафиксированы мощные землетрясения. Для каждой области рассматривался некоторый отрезок дуги большого круга на земном шаре, вдоль него строилась батиметрия с использованием данных о глубине, полученных с помощью программного комплекса WolframMathematica. После вычислялись коэффициенты исходного и осредненного уравнения, строились и изучались решения на интервале времени, за который начальное возмущение не успевало распространиться до границ бассейна; подбирались и изучались параметры метода. В результате численных экспериментов были подобраны оптимальные параметры, обеспечивающие хорошую согласованность численных решений исходного и осредненного уравнения для большинства регионов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №17-01-00644а.

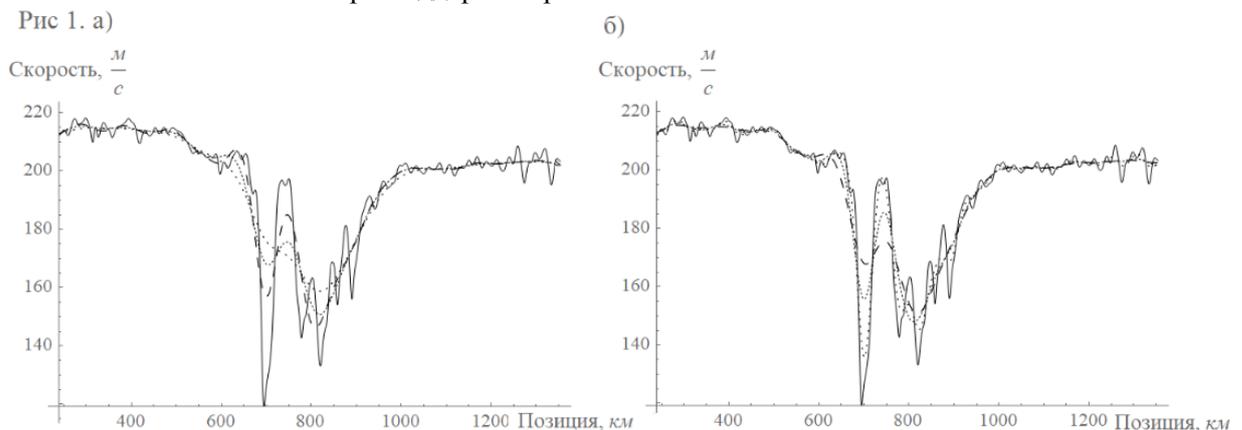


Рис. 1. а) График исходной (непрерывной линией) и усредненной глубины (пунктирные линии) при различных порядках ядра усреднения. б) График исходной (непрерывной линией) и усредненной глубины (пунктирные линии) при различных значениях радиуса осреднения.

Литература

1. Пелиновский Е. Н. Гидродинамика волн цунами. Нижний Новгород: ИПФ РАН, 1996.
2. Доброхотов С. Ю., Назайкинский В. Е., Тироцци Б. О методе осреднения для дифференциальных операторов с осциллирующими коэффициентами. Докл. РАН. 2015. Т. 461, №5. С.516-520.

УДК 517.955

Асимптотики решения волнового уравнения с вырождающейся скоростью и задача о набеге длинных волн на берег

А.Ю. Аникин^{1,2}, С.Ю. Доброхотов^{1,2}, В.Е. Назайкинский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт Проблем Механики РАН им. А.Ю.

Рассмотрим волновое уравнение в области с границей в предположении, что скорость обращается в нуль на границе как квадратный корень из расстояния до границы. Асимптотические решения такого уравнения могут быть записаны в терминах модифицированного канонического оператора [1,2] на лагранжевом многообразии нестандартного фазового пространства (представляющего из себя обычное фазовое пространство, «пополненное бесконечными импульсами»). Мы приводим простые и эффективные формулы [3] для функций, представимых таким каноническим оператором. В частности, получены формулы для решения задачи Коши для исходного уравнения с локализованными начальными данными.

Работа выполнена при поддержке гранта РФ (проект № 16-11-10282).

Литература

1. Назайкинский В.Е., *Геометрия фазового пространства для волнового уравнения, вырождающегося на границе области* // Матем. Заметки. 2012. Т. 92. № 1. Стр. 153–156.
2. Назайкинский В.Е. Канонический оператор Маслова на лагранжевых многообразиях в фазовом пространстве, соответствующем вырождающемуся на границе волновому уравнению // Матем. Заметки. 2014. Т. 96. № 2. Стр. 261-- 276.
3. Аникин А.Ю., Доброхотов С.Ю., Назайкинский В.Е. Простые асимптотики обобщенного волнового уравнения с вырождающейся скоростью и их приложения в линейной задаче о набеге длинных волн на берег // Матем. Заметки. 2018. Т. 104. № 4. Стр. 483–504.

УДК 539.1

Моделирование структуры и электропроводности кластера биметаллической фрактальной нанопленки

Д.Н. Бухаров, О.А. Новикова, А.В. Истратов, А.А. Антипов

Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых

В данной работе представлен метод получения биметаллических покрытий на основе наночастиц золота и серебра путем термодиффузионного осаждения металлических наночастиц на поверхность стеклянной подложки и моделирование получившихся покрытий и их электропроводных свойств.

Для формирования биметаллических фрактальных пленок методом лазерного осаждения металлов из растворов, подготовленный раствор из наночастиц серебра, золота и их смеси наносился на подложку из капилляра с диаметром 50 мкм (стекло, шлифованное К-8), предварительно нагретую до 60°C, тонким слоем с высотой не более 1 мм. После лазерного воздействия и образования на поверхности подложек кластеров они исследовались с использованием зондовой нанолаборатории Интегра-Аура (рис. 1).

Во всех случаях в процессе осаждения на поверхности стеклянной подложки формируются кластерные структуры. При осаждении коллоидов из золота и серебра образуются кластерные структуры типа дендритов.

При осаждении частиц из смешанного коллоида Au–Ag образуются более разреженные в пространстве кластерные структуры, которые уже имеют более явную общую поверхность, что позволяет говорить о плавлении частиц в процессе образования кластера. [1]

Модель DLA [2] была выбрана для описания формирования агрегатов фрактальной пленки по ряду причин: результаты экспериментальных исследований [1] показывают, что имеет место термодиффузия, которая достаточно хорошо моделируется в DLA приближении, а также а так же элементы экспериментальной пленки визуально похожи на фрактальные кластеры, получаемые по алгоритму DLA (рис. 1) с присущими фрактальными свойствами.

Для моделирования кластера затравочная частица размещалась в центре расчетной области. Так как в модели взаимодействие между частицами отсутствует, рассматривается только взаимодействие свободной частицы и неподвижного кластера.

При моделировании варьировалась начальная концентрация и вероятности слипания частиц и центров агрегации в рамках двумерной окрестности фон Неймана порядка 1. [3]

Влияние величины вероятности слипания на форму кластера пленки можно оценить из рис 2. При уменьшении значения вероятности прилипания генерируемый фрактал становится практически равномерно распределенным по краям.

Чем выше вероятность прилипания, тем более разветвленной образуется фрактальная структура и пленка становится так же более неоднородной с дендритообразным профилем, что подтверждается величинами фрактальной размерности.

Измерение вольтамперных характеристик производилось с использованием четырехзондовой схемы с линейным расположением контактов [4]. На рис. 3 приведены измеренные вольт амперные характеристики биметаллической пленки.

Электропроводные свойства моделировались в классическом приближении закона Ома для участка цепи. Сопротивление для сильно разветвленных кластеров рассчитывалось по классической формуле, где величина пути проводимости рассчитывались исходя из радиуса смоделированного кластера [5], а соотношение серебряных и золотых частиц выбиралось равным 50:50.

Смоделированные вольт амперные характеристики при варьировании напряжения от 0,05 до 1 В для рис. 2 г) приведены на рис. 4.

Работа выполнена при поддержке гранта МК-3053.2017.2 и проектной части госзадания 16.1123.2017.4.6

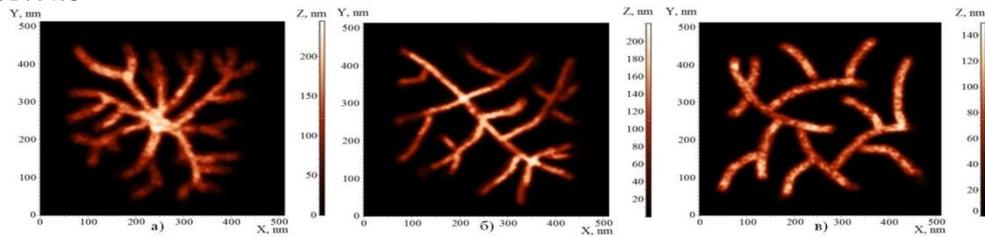


Рис. 1. АСМ изображения осажденных кластерных структур Ag (а), Au (б), Ag/Au (с).

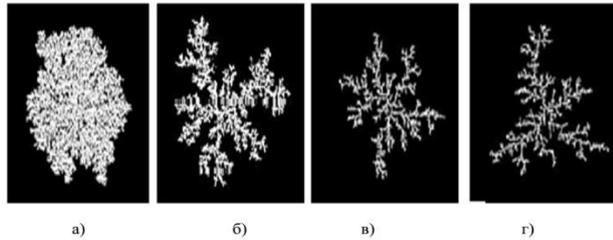


Рис. 2. Модельные изображения фрактальных структур островка пленки при величине вероятности прилипания: а) 0.01 б) 0.1 в) 0.5 г) 1

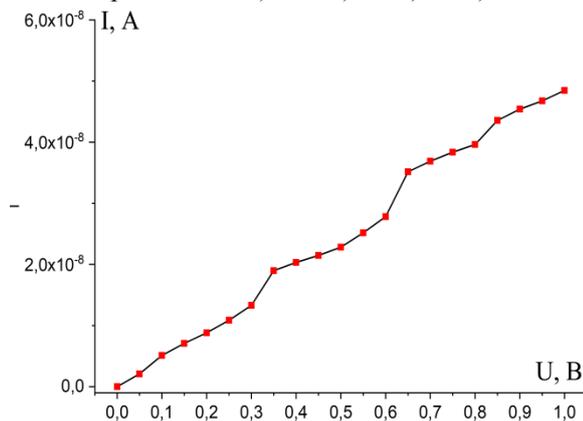


Рис. 3. Измеренные вольтамперные.

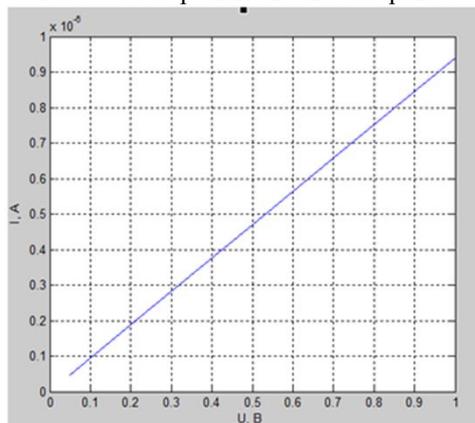


Рис.4. Смоделированные вольт амперные характеристики биметаллической характеристики пленки Ag/Au

Литература

1. Антипов А.А. и др. Осаждение биметаллических кластеров Au/Ag с использованием метода лазерного осаждения наночастиц из коллоидных систем/ Антипов А.А., Аракелян С.М., Кутровская С.В., Кучерик А.О., Варганян Т.А.//Оптика и спектроскопия, 2014, т.116. № 2. С.349-352.
2. Меньшутин А.Ю., Щур Л.Н., Многомерное обобщение модели Diffusion Limited Aggregation (DLA)//Механика, управление и информатика, 2014 т.6, №6(51) .С. 110-120
3. Калмыков Л.В., Калмыков В.Л., Исследование индивидуально-ориентированных механизмов динамики

- одновидовой популяции с помощью логических детерминированных клеточных автоматов// Компьютерные исследования и моделирование, 2015, т. 7. № 6. С. 1279-1293.
4. *Smits, F. M.* Measurement of Sheet Resistivities with the 4-point Probe//Bell System Technical Journal 37, 1958. P. 711–718. П.В.
 5. Москалев П. В. Анализ структуры перколяционного кластера, Журнал технической физики, т. 79, вып. 6, 2009.

УДК 517.9

Волны на поверхности жидкости, создаваемые движущимися источниками.

П.Н. Петров^{1,2}, С.Ю. Доброхотов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

В линейном приближении уравнений мелкой воды [1,2] цунами может быть описано волновым уравнением для возвышения свободной поверхности жидкости. Мы рассматриваем задачу Коши для волнового уравнения с переменными коэффициентами с правой частью, локализованной в окрестности движущейся точки, предполагается, что время движения источника конечное.

Асимптотика решения задач такого типа на основе модифицированного канонического оператора Маслова изучалась во многих работах, например, [3]. Было показано, что решение задачи Коши для неоднородного волнового уравнения представимо в виде решения задачи Коши для однородного волнового уравнения с «эквивалентными» начальными данными.

В этой работе мы развиваем метод [3] и применяем полученные асимптотические формулы для описания цунами, появляющегося вследствие движения подводного оползня.

Литература

1. *Пелиновский Е.Н.* Гидродинамика волн цунами. Нижний Новгород: ИПФ РАН, 1996. 276 с.
2. *Мазова Р.Х.* Исследование механизмов генерации катастрофических цунами и анализ особенностей их распространения. Нижний Новгород: ИО РАН, 2007. 387 с.
3. *Dobrokhotov S. Yu., Minenkov D. S., Nazaykinskii V.E., Tirozzi B.* Functions of Noncommuting Operators in an Asymptotic Problem for a 2D Wave Equation with Variable Velocity and Localized Right-Hand Side // Oper. Theory Adv. Appl – 2013. – V. 228, P. 95 – 126.

СЕКЦИЯ НБИК-ТЕХНОЛОГИЙ

Председатель: П.К. Кашкаров

Зам. председателя: В.Г. Орлов

Секретарь: Г.С. Сергеев

Дата: 22-23.11.2018

Время: 15:40

Место: Москва, ул. Максимова, д. 4, ауд.
27

УДК 541.64:539.2

Исследование влияния способа эксфолиации β -хитина на механические свойства композитов на основе полиакриловой кислоты

Н.А. Глушкова^{1,2}, О.И. Богданова^{1,3}, А.П. Истомина^{1,4}, Д.Р. Стрельцов^{1,3}, С.Н. Чвалун^{1,2,3,4}

¹Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

³Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

⁴Московский Технологический Университет (МИТХТ)

Хитин – это один из наиболее распространенных природных полисахаридов, выполняющий в живых организмах опорную и двигательную функции. Хитин в живых организмах образует фибриллы с большим характеристическим отношением длины к их диаметру и высокими механическими свойствами [1]. Наиболее стабильная и часто встречаемая кристаллическая структура – α -хитин, β -хитин менее распространен. В данной работе мы сфокусировались на исследовании двух способов эксфолиации β -хитина и их влиянии на механические свойства композитов на основе этого полисахарида и полиакриловой кислоты.

Первичная обработка заключалась в удалении белка из гладиуса кальмара путём депротенирования в растворе 5% NaOH при комнатной температуре в течение 24 часа.

На втором этапе разработаны методы эксфолиации β -хитина в водном растворе с добавлением акриловой [2] или аскорбиновой кислот. С помощью рентгеноструктурного анализа и ИК-спектроскопии на каждом этапе отслеживались структурные изменения хитина.

Для эксфолированного хитина были проведены реологические испытания. В результате были подобраны оптимальные концентрации акриловой и аскорбиновой кислот и время эксфолиации. Морфология эксфолированного хитина была исследована методом атомно-силовой микроскопии (рис. 1). Показано, что процесс эксфолиации с добавлением указанных кислот не приводит к значительному разрушению аморфной фазы нативных фибрилл хитина.

Методом полимеризационного наполнения на основе полиакриловой кислоты и β -хитина были получены нанокомпозиты с содержанием полисахарида 1–3 %мас. Их механические свойства исследовали при контролируемых:

- 1) относительной влажности воздуха на универсальной разрывной машине Instron 5965 при комнатной температуре (рис. 2а);
 - 2) температуре на приборе TA Instruments Q800 в диапазоне 25–250 °C (рис. 2б).
- Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 17-73-10324.

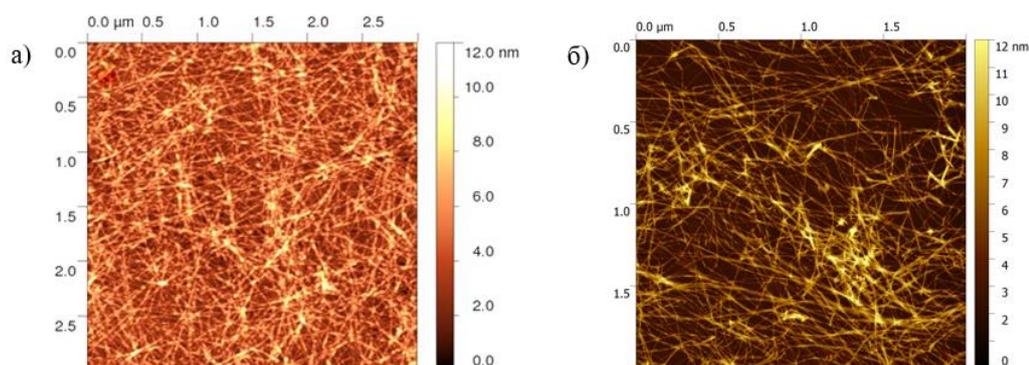


Рис. 1. АСМ-изображения фибрилл β -хитина, полученных различными методами: (а) эксфолиацией в водном растворе акриловой кислоты, (б) эксфолиацией в водном растворе аскорбиновой кислоты.

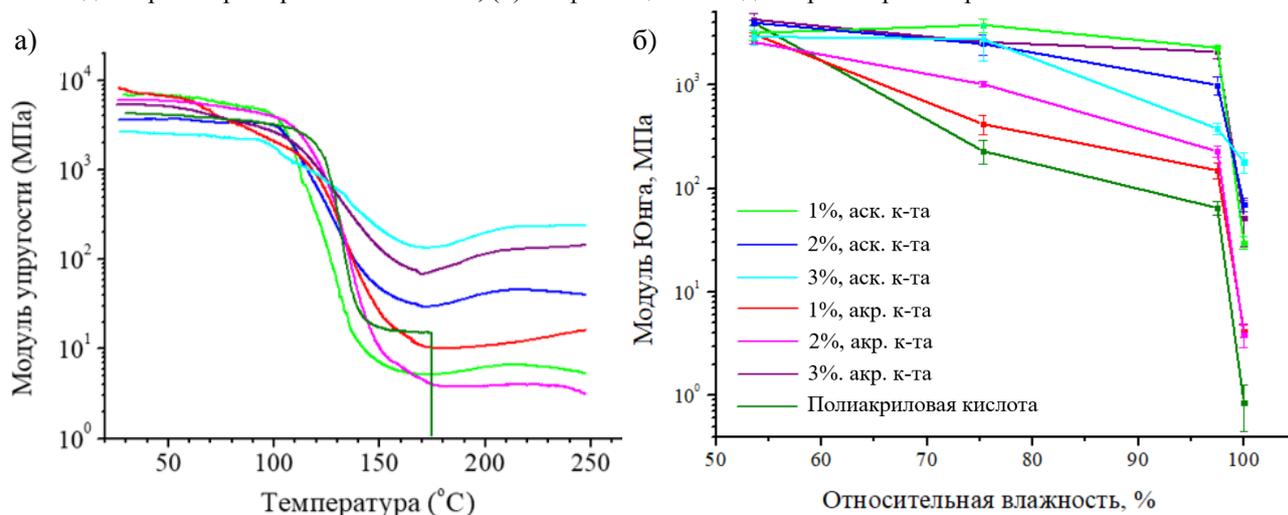


Рис. 2. Зависимость модуля упругости (Юнга) от температуры (а) и влажности воздуха (б) для полиакриловой кислоты композиционных материалов ПАК/хитин.

Литература

1. *О.И. Богданова, С.Н. Чвалун* Природные и синтетические нанокomпозиты на основе полисахаридов // Высокомолекулярные соединения. Серия А, 2016, том 58, №5, с. 407–438
2. *О.И. Богданова, Д.К. Поляков, Д.Р. Стрельцов, С.Н. Чвалун* Синтез композиционных материалов на основе β -хитина и полиакриловой кислоты // Известия уфимского научного центра РАН. 2014. №3. с. 48-51

УДК 57.087.3, 57.085.21

Трехмерный анализ изменений пролиферативной активности клеток под действием мемантина в мозге взрослой мыши

Р.А. Кирьянов¹, А.А. Лазуткин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИИ нормальной физиологии им. П.К. Анохина

В головном мозге млекопитающих существуют области, в которых в течение всей жизни происходит нейрогенез, т.е. появление новых нейронов из стволовых клеток. К таким областям относят субвентрикулярную зону боковых желудочков и субгранулярный слой зубчатой извилины гиппокампа [1]. Также в современных работах показано наличие пролиферирующих клеток и в других областях мозга (например, стриатуме, отдельных областях коры) [2]. Активность процессов нейрогенеза может регулироваться различными факторами. Среди угнетающих воздействий можно выделить химиотерапию, облучение радиацией и многие другие [3]. Факторов, усиливающих пролиферативную активность, известно меньше: например, бег, некоторые виды препаратов [4]. Среди последних большой интерес представляет мемантин - соединение, активно применяемое для лечения тяжелой и средней форм болезни Альцгеймера, паркинсонизма и других типов деменции. Введение мемантина дает стабильный усиливающий эффект на нейрогенез [5]. Однако такие

данные были получены только на срезах гиппокампа, и воздействие мемантина на другие нейрогенные ниши в целом мозге до сих пор не изучено.

Сегодня активно развиваются методы трехмерной визуализации и анализа, позволяющие учесть пространственные особенности расположения клеток и изучать весь мозг целиком. Целью данной работы было оценить эффекты введения мемантина на пролиферацию клеток в объеме целого мозга взрослой мыши при помощи таких методов.

В работе использовали трансгенных гомозиготных самцов мыши линии Nestin-CFP^{nu} в возрасте 72-75 дней ($N = 10$). На протяжении 5-ти дней животным экспериментальной группы ($N = 5$) вводили внутривентрикулярно мемантин (50 мг /кг веса животного), животные контрольной группы ($N = 5$) получали физраствор. Для маркирования делящихся клеток мышам вводили синтетический аналог тимидина - этинил-2'-дезоксисуридин (ЭдУ). Ранее было показано, что ЭдУ встраивается в ДНК в процессе ее репликации в S-фазе жизненного цикла клетки [6]. Места включения ЭдУ выявляли при помощи клик-реакции в целых фиксированных образцах мозга. Для выполнения съемки образцы делали оптически прозрачными методом iDISCO+ [7]. На светоплоскостном флуоресцентном томографе получали изображения двумерных оптических срезов, из которых реконструировали трехмерный объем мозга.

Полученные изображения выравнивали между собой по гистограммам и устраняли артефакты съемки при помощи последовательности морфологических операций. После этого выполняли математическое совмещение трехмерных изображений: объем каждого реконструированного мозга локально деформировали для достижения максимального совпадения анатомических структур с соответствующими структурами случайно выбранного образца. Первый этап данной операции выполнялся автоматически: трехмерное изображение последовательно разбивали на параллелепипеды в 2, 4 и 8 раз меньше оригинального изображения, после чего с данными частями выполняли случайные деформации и оценивали качество совпадения изображений.

$$m\text{cov}(im_1, im_2) = \frac{\sum(im_1 * im_2)}{\|im_1\| * \|im_2\|} - \delta * \frac{\Delta V_{im_{1,2}}}{6} \quad (1)$$

Здесь im_1, im_2 – соответствующие части трехмерных изображений двух различных образцов, δ – степень свободы деформации, $\Delta V_{im_{1,2}}$ – приращение объема (в пикселях) деформируемой части.

Критерием качества совпадения была выбрана модифицированная функция ковариации $m\text{cov}$, учитывающая регуляризационный член – степень деформации (1). Методом «имитации отжига» производился поиск максимума данной функции между двумя трехмерными изображениями различных образцов. Все операции предобработки и трансформации выполнялись в среде MATLAB.

Неточности результата работы автоматических алгоритмов корректировали вручную в программе 3D Slicer 4.8.1 при помощи операции «landmark-based correction» [8]. Для этого выполняли расстановку маркеров на соответствующих анатомических структурах в разных образцах, по которым формировалась матрица трансформации. Выравненные объемные изображения усредняли по группам, после чего отделяли изображение клеток от фона (аутофлуоресцентного сигнала) при помощи медианного фильтра и фильтра Виннера. Оценку различий между усредненными по группам изображениями клеток выполняли по разности плотности интенсивности изображений. При этом все изменения, превышающие внутригрупповые различия, представляли в виде трехмерной карты при помощи цветовой кодировки.

Эффекты мемантина на пролиферацию/миграцию клеток были выявлены во всех нейрогенных зонах взрослого мозга (субвентрикулярной, субкаллозальной зонах, ростральном миграционном пути). Особенно выраженное увеличение плотности сигнала было обнаружено в зубчатой извилине гиппокампа. Кроме того, впервые были обнаружены клетки, включившие ЭдУ, в вентро-каудальной части коры больших полушарий, включающей в себя каудальную часть пириформной коры, а также постпириформную переходную и кортико-амигдаларную области.

Работа поддержана грантами РНФ 16-15-00294, № 17-15-01426 и РФФИ 17-29-01037

Литература

1. Kempermann G., Jessberger S., Steiner B., Kronenberg G. Milestones of neuronal development in the adult hippocampus // Trends in Neurosciences. 2004 P. 447-452.

2. *Bonfanti L., Peretto P.* Adult neurogenesis in mammals – a theme with many variations // *The European Journal of Neuroscience*. 2011 V. 34(6) P. 930-950.
3. *Christie L., Acharya M., Parihar V., Nguyen A., Martirosian V., Limoli C.* Impaired cognitive function and hippocampal neurogenesis following cancer chemotherapy // *Clinical Cancer Research*. 2012 V.18 P.1954–1965
4. *van Praag H.* (2008) Neurogenesis and exercise: past and future directions // *Neuromolecular*. 2008 V.10 P.128-140
5. *Maekawa M., Namba T., Suzuki E., Yuasa S., Kohsaka S., Uchino S.* NMDA receptor antagonist memantine promotes cell proliferation and production of mature granule neurons in the adult hippocampus // *Neuroscience Research*. 2009 V. 63(4) P. 259-266.
6. *Salic A., Mitchison T.J.* A chemical method for fast and sensitive detection of DNA synthesis in vivo // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 2008 V. 105(7) P. 2415-2420.
7. *Renier N., Adams E.L., Kirst C., Wu Z., Azevedo R., Kohl J., Autry A.E., Kadiri L., [et al.]* Mapping of Brain Activity by Automated Volume Analysis of Immediate Early Genes // *Cell* 2016 V. 165 P. 1789-1802.
8. *Fedorov A., Beichel R., Kalpathy-Cramer J., Finet J., Fillion-Robin J-C., [et al.]* 3D Slicer as an Image Computing Platform for the Quantitative Imaging Network // *Magnetic Resonance Imaging* 2012 V. 30(9) P. 1323-1341.

УДК 538.95

Изучение нейроморфных систем на основе нанокompозитных мемристоров

К.Э. Никируй^{1,2}, А.В. Емельянов^{1,2}, В.А. Демин^{1,2}, В.В. Рыльков¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Интенсивное применение программных нейронных сетей в современном мире диктует необходимость создания их аналогов в аппаратной реализации, таким аналогом являются нейроморфные системы. Особый интерес представляют, так называемые, спайковые нейроморфные системы (СНС), поскольку они открывают возможность решения антропоморфных задач (распознавание образов, принятие решений, прогнозирование и т.д.) по биологически правдоподобным механизмам. СНС представляют собой совокупность нейронов и соединяющих их синапсов, в роли которых выступают мемристоры. В данной работе проводилось исследование свойств однослойных СНС на примере простейшей системы с одним постсинаптическим нейроном. Синаптические связи были реализованы нанокompозитными (НК) мемристорами изготовленными методом ионно-лучевого распыления составной мишени $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ и LiNbO_3 . Переключение мемристоров осуществляется шунтированием прослойки проводящими филаментами из вакансий кислорода, выступающими в роли легирующей примеси n-типа [1].

Применение НК мемристоров в качестве синапсов обусловлено их хорошей пластичностью (ошибка переключения в заданное состояние менее 0.5%) [2], большим количеством циклов переключения (более 10^6), возможностью обучения с помощью правил зависимости пластичности от времени спайков (spike timing dependent plasticity - STDP). Последний параметр является одним из ключевых для построения обучаемой СНС: при малой задержке по времени между пре- и постсинаптическими спайками их очередность определяет увеличение или уменьшение проводимости мемристора. В проведенных экспериментах активность пресинаптических нейронов была задана заранее, а постсинаптический нейрон генерировал спайки при превышении порогового значения суммарного тока на всех мемристорах.

Было показано, что результат обучения системы качественно не зависит от начального состояния системы, что подтверждает результаты моделирования СНС [3]. Однако при разных условиях обучения конечное состояние может изменяться, что позволяет регулировать обучение и получать ожидаемое конечное состояние системы. Таким образом, было проведено два типа обучения: обучение пуассоновской последовательностью импульсов и обучение последовательностями с разными частотами. Первый тип обучения приводит к промежуточным состояниям системы и не зависит от разброса характеристик отдельных мемристоров. Второй тип обучения направлен на получение крайних состояний сопротивлений (R_{on} , R_{off}) в различных комбинациях в зависимости от соотношения подаваемых импульсов.

По итогам работы создан аппаратно-программный комплекс на основе мемристоров и программируемых нейронов, позволяющий изучать однослойные СНС, на базе которых возможно дальнейшее создание более сложных систем.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 18-79-10253 на оборудовании ресурсного центра электрофизических методов (НИЦ «Курчатовский институт»).

Литература

1. Рыльков В.В., Николаев С.Н., Демин В.А., Емельянов А.В., Ситников А.В., Никируй К.Э., Леванов В.А., Пресняков М.Ю., Талденков А.Н., Васильев А.Л., Черноглазов К.Ю., Веденеев А.С., Калинин Ю.Е., Грановский А.Б., Тугушев В.В., Бугаев А.С. // ЖЭТФ, 2018г., Т. 153, стр. 424-441.
2. Никируй К.Э., Емельянов А.В., Демин В.А., Рыльков В.В., Ситников А.В., Кашикарров П.К. Прецизионный алгоритм переключения мемристора в состояние с заданным сопротивлением // Письма в ЖТФ, 2018г., Т.44, с.20-28.
3. Prezioso M., Merrikkh-Bayat F., Hoskins B., Likharev K., Strukov D. Self-Adaptive Spike-Time-Dependent Plasticity of Metal-Oxide Memristors. //Sci. Rep., 2016, 6, 21331.

УДК 579.66

Применение гидрогелей на электродах для изучения ферментных биотопливных элементов на основе *Glucose Oxidase*

Д.А. Газизова¹, М.В. Вишневецкая^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

² НИЦ Курчатовский Институт

На сегодняшний день поиск новых возобновляемых источников энергии является одним из широко исследуемых вопросов в науке. Примером устройства, позволяющего получать электроэнергию за счет окислительно-восстановительных реакций, проходящих на аноде, является ферментный биотопливный элемент (ФБТЭ), в котором в качестве биотоплива может использоваться глюкоза, а катализатором её окисления выступает фермент [1].

Ферменты в таких устройствах могут быть помещены непосредственно в объёме раствора, а могут быть иммобилизованы на поверхности электрода. Использование гидрогелей – один из новых методов закрепления фермента на поверхности электрода. Некоторые свойства таких гелей позволяют увеличить стабильность и время жизни фермента, а также нанести фермент в большем количестве благодаря его пористой структуре.

В данной работе был использован фермент *Glucose Oxidase (GOx)*, который для окисления глюкозы был нанесён на гидрогель, закреплённый на аноде. Гидрогель на основе таких полимерных материалов, как поливиниловый спирт (PVA) и йота-каррагинан (i-CRG), был получен по методике из [2]. PEDOT:PSS (Поли(3, 4-этилендиокситиофен) легированный полистиролсульфонатом) был добавлен в состав анода для увеличения электропроводности.

Для анализа возможности использования такого геля в составе анода ФБТЭ на потенциостате были сняты вольт-амперные характеристики (ВАХ) собранных биотопливных ячеек.

По полученным ВАХ были рассчитаны электроёмкости ФБТЭ. В разработанной ячейке, в случае, когда субстратом выступал физ. раствор глюкозы, электроёмкость составила $1,931 \cdot 10^{-4}$ Ф/см².

Литература

1. M. Rasmussen, S. Abdellaoui, and S. D. Minteer, Enzymatic biofuel cells: 30 years of critical advancements // Biosensors and Bioelectronics. 2016. V. 76. P. 91–102.
2. G. U. Badranova et al., Biopolymer-based hydrogels for encapsulation of photocatalytic TiO₂nanoparticles prepared by the freezing/thawing method // Journal of Molecular Liquids. 2016. V. 223. P. 16–20.

УДК 577.34, 579.65

Исследование воздействия космического излучения на фототрофные микроорганизмы

Д.В. Сухинов, П.М. Готовцев, А.В. Борголов, С.Т. Латушкин

Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт»

В настоящее время идет активная разработка технологий и устройств, позволяющих человеку находиться на протяжении долгого времени в замкнутом герметичном пространстве с ограниченными ресурсами, так называемых CELSS – закрытых экологических систем

жизнеобеспечения. Они необходимы для обеспечения нормального существования и работы экипажа космического корабля в течение долгосрочных пилотируемых миссий, таких как полёт на Луну или Марс с возможностью остаться на их поверхности для проведения необходимых экспериментов и исследований.

Сегодня в ряде проектов, в качестве центрального элемента в системах жизнеобеспечения рассматриваются фототрофные микроорганизмы, в частности цианобактерии - наиболее перспективные организмы, способные удовлетворить сразу несколько потребностей экипажа, таких как: обеспечение космонавтов кислородом, продуктами питания (для этого выбираются съедобные цианобактерии) и фиксация углекислого газа.

В данной работе изучается воздействие космических ионизирующих частиц на рост и функционирование съедобной цианобактерии *Arthrospira platensis*. До этого момента изучалось воздействие лишь электромагнитного ионизирующего излучения на различные цианобактерии, в том числе и *Arthrospira pl.* [1]. Космическое излучение было смоделировано при помощи Курчатовского циклотрона. Для определения величины поглощенной дозы, которую получит экипаж и цианобактерии во время 7-8 месячного полета на Марс, были взяты данные NASA [2]. Согласно их измерениям средняя доза ионизирующего излучения составит примерно 480 мкГр/день или примерно 100 - 150 мГр за весь период полета от Земли до поверхности Марса. Облучению *Arthrospira pl.* подвергалась в двух формах: в лиофилизованной и в виде суспензии, поскольку первая форма будет использоваться во время ее хранения, а вторая во время роста и приготовления к употреблению.

Далее облученные образцы были выращены в одинаковых условиях с контрольными. Были сняты кривые роста и выяснено количественное содержание пигментов, по которым были установлены закономерности влияния космического ионизирующего излучения на рост биомассы и ее функциональные способности.

Литература

1. *Badri H., Monsieurs P., Coninx I., Wattiez R., and Leys N.*, "Molecular investigation of the radiation resistance of edible cyanobacterium *Arthrospira* sp. PCC 8005," *Microbiologyopen*, V. 4, N. 2, PP. 187–207, Apr. 2015.
2. *Hassler D.M. et al.*, "Mars' Surface Radiation Environment Measured with the Mars Science Laboratory's Curiosity Rover," *Science* (80-.), V. 343, N. 6169, PP. 1244797–1244797, Jan. 2014.

УДК 538.975

Исследование физической адсорбции полярных молекул $C_{60}F_{18}$ на высокоориентированном пиролитическом графите

А.В. Горячевский¹, Л.П. Суханов^{1,2}, Р.Г. Чумаков¹, В.Г. Станкевич¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Для адекватного описания адсорбции полярных молекул $C_{60}F_{18}$ на поверхности высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) были проведены квантово-химические исследования электрических и электронных свойств отдельной молекулы. Используя различные методы квантовой химии, в частности, метод Хартри-Фока (ХФ) [1], Мёллера-Плессе (МП) [2] и теорию функционала плотности (ТФП) [3], были проведены квантово-химические расчеты молекулы $C_{60}F_{18}$ на поверхности ВОПГ, использующие кластерную модель. В качестве кластера, моделирующего молекулу фтор-фуллерена, была выбрана молекула фтор-метана CH_3F , а в качестве модельной системы для поверхности ВОПГ была выбрана молекула бензола C_6H_6 . Молекулы были ориентированы с таким расчетом (рис. 1), чтобы ось симметрии шестого порядка молекулы бензола совпадала с осью симметрии третьего порядка молекулы фтор-метана, и система в целом сохраняла симметрию C_{3v} .

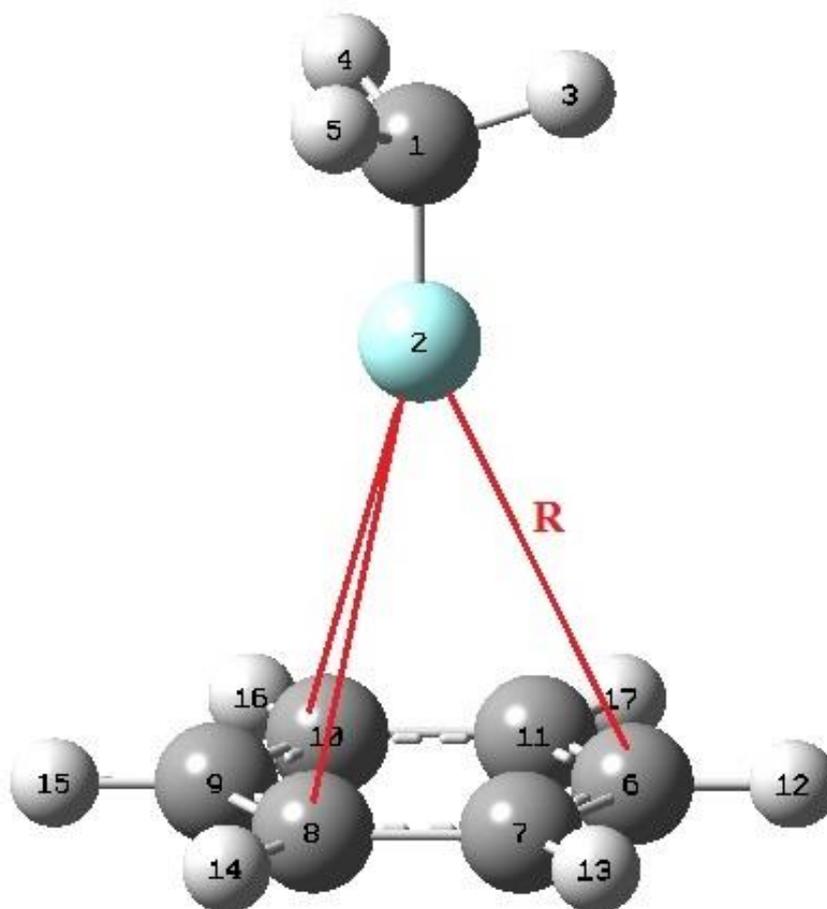


Рис. 1. Взаимная ориентация молекул CH_3F (сверху) и C_6H_6 (снизу) при проведении кластерного расчета. Атомы С – темные шары, атомы F и H – светлые шары.

Сканирование поверхности потенциальной энергии модельной системы методом МП второго порядка показало наличие слабосвязанного состояния. Варьируя расстояние R между молекулами (рис. 1), был найден минимум потенциальной энергии, что говорит о физической адсорбции молекул $\text{C}_{60}\text{F}_{18}$ на ВОПГ, обусловленной силами Ван-дер-Ваальса. Отсутствие химической адсорбции было также показано с помощью теории молекулярных орбиталей [2]. Анализ заселенностей по Малликену [2] показал ничтожный перенос заряда с молекулы CH_3F на молекулу C_6H_6 ($0.04e$, где e – заряд электрона), что также свидетельствует об отсутствии химической формы адсорбции.

Информация об электронных и электрических свойствах отдельных молекул открывает возможность лучше понять причины адсорбции молекулярных ансамблей на различных поверхностях.

Литература

3. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. Пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 394 с., ил.
4. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. Пер. с японск. – М.: Мир, 1983. – 461 с., ил.
5. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. // Phys. Rev. A. 1965. V. 140. №4. P. A1133-A1138.

УДК 57.03

Влияние рН на скорость фотоциклических переходов в фотоактивном оранжевом каротиноидном белке

П.А. Бабаев¹, М.И. Янтурина¹, Е.Г. Максимов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Оранжевый каротиноидный белок (далее ОСР) является сенсором и эффектором фотозащитных реакций у цианобактерий. Небольшой (35 кДа) водорастворимый белок состоит из двух структурных доменов нековалентно связывающих одну молекулу кето-каротиноида. Согласно современным представлениям, при поглощении квантов света происходит изомеризация каротиноида и разрыв водородных связей между кислородом и остатками тирозина-201 и триптофана-288. Фотоизомеризация приводит к образованию красной формы ОСР, которая может стабилизироваться за счет значительных изменений третичной структуры ОСР и нарушения белок-белковых взаимодействий между структурными доменами. Механизм фотоактивации ОСР остается предметом научных дискуссий из-за отсутствия информации о структуре промежуточных состояний фотоцикла. По некоторым представлениям разрыв водородных связей сопровождается образованием так называемого состояния с переносом заряда [1]. Соответственно, pH должен оказывать влияние на способность ОСР к фотоактивации. Целью данной работы являлась проверка данной гипотезы.

В работе использовали препараты ОСР с эхиненоном в качестве хромофора. Для изучения фотоциклических переходов регистрировали изменения поглощения ОСР при 550 нм под действием синего света. Кинетики переходных процессов обрабатывали согласно модели, подробно описанной в работе [2]. Для определения энергетических барьеров, фотоактивацию ОСР проводили при различных температурах.

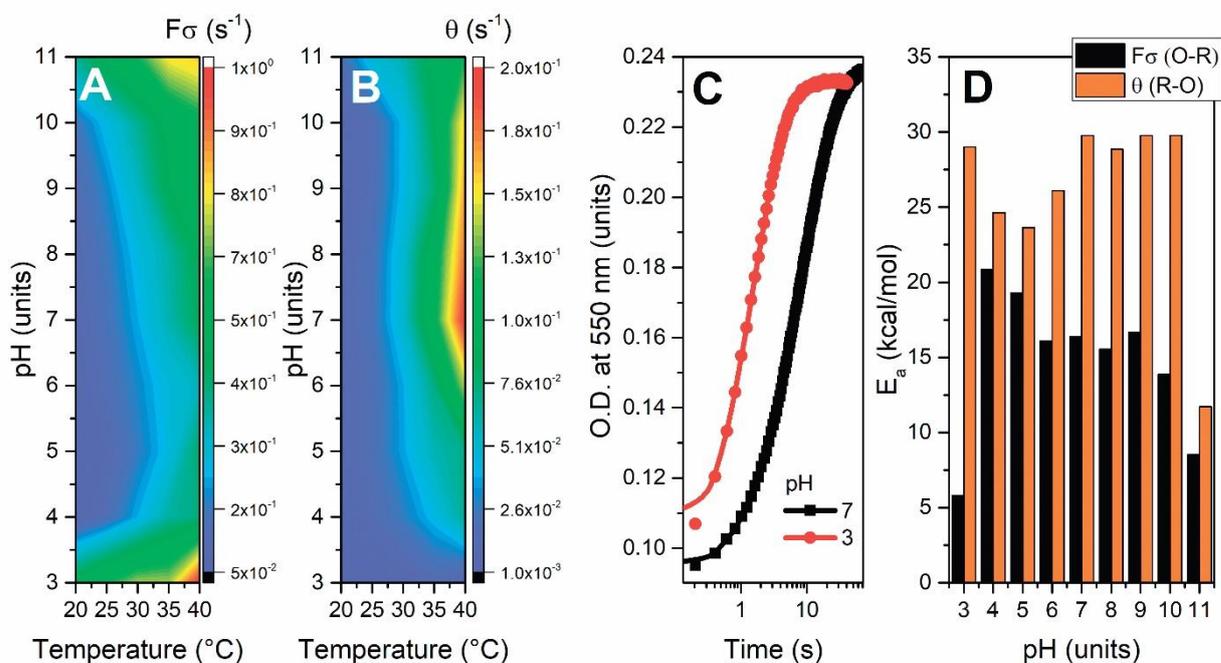


Рис. 1. Влияние pH на фотоцикл ОСР. Зависимости скоростей фотоактивации (A) и последующей релаксации (B) ОСР от pH и температуры. C – характерный вид кинетики накопления красной формы ОСР при pH = 3 и pH = 7. D – энергии активации фотоактивации и последующей релаксации ОСР при различных значениях pH.

Установлено, что ОСР обладает высокой стабильностью в широком диапазоне значений pH и сохраняет способность к фотоактивации. Даже при экстремальных значениях pH не наблюдалась агрегация белка и спонтанный переход оранжевой формы ОСР в красную, который, как известно, может происходить под действием хаотропов (NaSCN) и денатурирующих агентов (SDS). Наибольшая скорость фотоактивации наблюдается при экстремальных значениях pH. При pH = 3 значительно снижается величина энергетического барьера для фотоиндуцированного перехода ОСР из оранжевой формы в красную, что может свидетельствовать о стабилизации состояния с переносом заряда на начальных этапах фотоцикла ОСР.

Работа выполнена при поддержке РФФ.

Литература

1. Случанко Н. Н., Слонимский Ю. Б., Максимов Е. Г. Особенности Белок-Белковых Взаимодействий в Механизме Фотозащиты Цианобактерий // *Успехи биологической химии*. — 2017. — Т. 57. — С. 71–118.
2. E. G. Maksimov, E. A. Shirshin, N. N. Sluchanko et al. The signaling state of orange carotenoid protein // *Biophysical Journal*. — 2015. — Vol. 109, no. 3. — P. 595–607.

УДК 579.222.7

Направленный мутагенез тиоцианатдегидрогеназы из *Thioalkalivibrio Paradoxus* для предотвращения тетрамеризации при кристаллизации.

А.С. Комолов^{1,2}, Т.В. Ракитина¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Тиоцианатдегидрогеназа (ТСДН) - это ключевой фермент, участвующий в метаболизме серы в галотермофильной бактерии *Thioalkalivibrio paradoxus*. Он окисляет тиоцианат с последующим образованием цианата и элементарной серы, также побочным продуктом является ионы водорода и свободные электроны, которые переходят в электронотранспортную сеть. Соответствующую реакцию можно увидеть на рис.1.

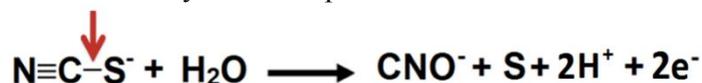


Рис. 1.

При кристаллизации этого белка в элементарной ячейке образовывались тетрамеры, но в нативном состоянии этот белок существует в качестве димера. Поэтому было решено провести направленный мутагенез заряженных остатков, с целью устранения аномальных междимерных контактов. Целью работы являлось проведение мутагенеза методом quick change и проверка растворимости полученных мутантов.

УДК 57.087

Анализ концентрации хлорофилла *a* в крупнейших водоёмах с помощью методов машинного обучения

А.П. Руденко^{1,2}, В.А. Иванов^{1,2}, А.А. Мельникова², А.В. Комова², З.Б. Намсараев^{1,2}, А.Б. Теслюк²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИЦ «Курчатовский институт»

Дистанционное зондирование с помощью космических аппаратов являются одним из наиболее эффективных и часто применяемых способов изучения процессов в крупных водоёмах. В частности, дистанционные методы зондирования позволяют анализировать распределение фотосинтезирующих микроорганизмов в водоёмах путем измерения концентрации хлорофилла *a* в поверхностных слоях воды. Для этого производится анализ поглощения в красной и синей зонах спектра на спутниковых изображениях и сравнение с концентрацией хлорофилла *a* измеренной в пробе воды отобранной в контрольной точке во время проведения спутниковой съемки. Расчёт концентрации хлорофилла *a* по профилю поглощения сигнала на изображениях является классической задачей восстановления регрессии. В данной работе представлен алгоритм для расчёта концентрации с помощью ряда методов машинного обучения, проведен сравнительный анализ эффективности методов и параметров обучения, оценены показатели погрешности метода.

Литература

1. Namsaraev Z., Melnikova A., Ivanov V., Komova A., & Teslyuk A. Cyanobacterial bloom in the world largest freshwater lake Baikal // In IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. 2018. Vol. 121, No. 3, p. 032-039

УДК 537.533.35

Исследование процессов биокристаллизации для защиты генетического материала с помощью криоэлектронной томографии

Р.А. Камышинский^{1,2}, Ю.М. Чесноков¹, А.С. Орехов^{1,2}, А.Л. Васильев^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт»

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

В настоящей работе с помощью криогенной электронной микроскопии детально проанализированы процессы кристаллизации белка Dps и ДНК, которые проявляются как защитный механизм при неблагоприятных условиях окружающей среды в бактериальных клетках *Escherichia coli* в стационарной фазе [1]. Впервые с помощью метода криоэлектронной томографии получены структурные характеристики биокристаллов Dps-ДНК как *in cellulo*, так и *in vitro*, что позволило экспериментально показать сходства и различия в строении биологических объектов в нативном состоянии и в искусственной среде.

Актуальность исследования процессов биокристаллизации определяется рядом важных причин. Прежде всего, *in vivo* кристаллизация белков и их комплексов с нуклеотидами, не поддающихся кристаллизации *in vitro*, дает уникальную возможность исследовать их структуру на атомном уровне непосредственно в клетке. Известно, что структура биологических объектов, закристаллизованных в искусственных камерах кристаллизации, и их структура в нативном состоянии может существенно отличаться. Поэтому знание строения компонентов клеток атомного разрешения *in cellulo* необходимо для понимания фундаментальных функциональных свойств живой материи.

Исследование проводилось с помощью криогенного просвечивающего электронного микроскопа Titan Krios (FEI, США), оснащенного высокочувствительной системой прямого детектирования электронов Falcon II (FEI, США) а также корректором сферических aberrаций (Image corrector, CEOS, Германия) при ускоряющем напряжении 300 кВ. Набор экспериментальных данных проводился в автоматическом режиме с помощью программного обеспечения Tomography (FEI, США) в режиме малых доз, что позволило минимизировать радиационные повреждения, сохраняя нативную структуру исследуемых объектов. Расчеты и трехмерная реконструкция проводились на мощностях многофункционального вычислительного комплекса Курчатовского центра обработки данных НИЦ «Курчатовский Институт».

Литература

1. Pletnev P., Osterman I., Sergiev P., Bogdanov A., Dontsova O. Survival guide: *Escherichia coli* in the stationary phase // *Acta Naturae*. 2015. V. 7. P. 22.

УДК 57.087

Моделирование активности дофаминового сигнального пути с помощью методов системной биологии

А.В. Шумилов¹, П.М. Готовцев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИЦ «Курчатовский институт»

Для исследования сложных биологических систем учёные часто обращаются к особым подразделам современной биологии – системной и вычислительной биологии и биохимии, использующие достижения информатики, физики и прикладной математики для решения задач.

Аналогия биохимических процессов с электрическими цепями на текущий день является интересным направлением, так как позволяет относительно просто моделировать сложные системы, базируясь на известном и проработанном математическом аппарате [1]. Объектом исследования выступает дофаминовый сигнальный путь, одну из центральных ролей в котором играет фосфопротейн DARPP-32, вовлечённый в регуляцию и управление дофамин-индуцированными транссинаптическими эффектами. Транскрипция и трансляция DARPP-32 моделировалась при помощи соответствующих электрических схем [2] (см. рисунок), его дальнейшее фосфорилирование моделировалось согласно ферментативной кинетике Михаэлиса-Ментен, в

результате чего были получены распределения концентрации фосфорилированного DARPP-32, влияющего на биологический эффект.

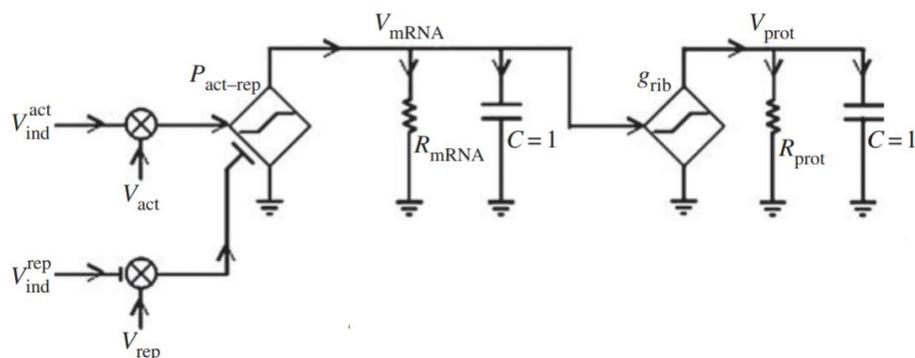


Рис. 1. Аналоговые схемы генетических цепей, воспроизводящих динамику процессов транскрипции и трансляции.

Литература

1. R. Daniel, J.R. Rubens, R. Sarpeshkar, and T.K. Lu, "Synthetic Analog Computation in Living Cells," *NATURE*, Vol. 497:7451, pp. 619-623, 2013; doi:10.1038/nature12148
2. Sarpeshkar R. Analog synthetic biology. *Phil. Trans. R. Soc.A* 372: 20130110, 2014

УДК 53.01

Изучение свойств мемристивных структур на основе оксидов металлов, содержащих металлические наночастицы

А.А. Королева^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИЦ «Курчатовский институт»

В последнее время неуклонно растет интерес к исследованию свойств мемристоров (структур металл-диэлектрик-металл, обладающих способностью в зависимости от протекшего через них заряда переключаться между двумя состояниями: с большим и малым сопротивлением) в связи с широкими возможностями их использования в электронике и нейроморфных системах [1]. Одной из возможностей влияния на свойства таких структур является добавление в матрицу оксида металла, часто выступающего в роли диэлектрика, металлических наночастиц [2]. Однако теоретическое описание многих аспектов поведения таких структур пока не получено. Данная работа посвящена описанию свойств и характеристик мемристоров на основе оксидов металлов, содержащих металлические наночастицы.

Рассмотрена модельная система, состоящая из оксидной матрицы и металлических наночастиц в двумерном случае. Показано, что добавление наночастиц в оксидную матрицу ускоряет переключение между состояниями с большим и малым сопротивлением. Проведены расчеты вольтамперных характеристик мемристивных структур на основе оксидов металлов, содержащих металлические наночастицы, при различных размерах и пространственном распределении наночастиц. Описан процесс формирования проводящих каналов для различных конфигураций наночастиц в оксидной матрице. Исследовано влияние наночастиц на емкостные характеристики системы.

Разработанная модель позволяет изучать влияние различных конфигураций наночастиц на процесс переключения и на основные параметры мемристивных систем (сопротивление, емкость и т.д.)

Литература

1. Strukov D.B., et al. The missing memristor found // *Nature*. 2008. № 7191 (453). p. 80–83.
2. Li X., et al. The dissimilar resistive switching properties in ZnO-Co and ZnO films // *Materials Research Express*. 2017. № 3 (4). p. 2-8

УДК 539.172.16

Исследование возможности получения медицинских изотопов Tb облучением Eu-мишени α -излучением

И.А. Хоменко

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Изотопы тербия перспективны для использования в ядерной медицине благодаря тому, что испускают Оже-электроны, α -частицы, позитроны и β -частицы. В частности, ^{149}Tb является уникальным изотопом. Данный радионуклид испускает как позитроны, так и α -частицы, что позволяет применять его и в диагностике (ПЭТ), и в лечении раковых опухолей.

Существуют различные способы получения ^{149}Tb . Один из них [1] – это ядерная реакция $^{151}\text{Eu}(^3\text{He}, 5n)^{149}\text{Tb}$. Достоинством этого метода является низкое значения порога реакции равное 29,3 МэВ. Также данный изотоп можно получить с помощью реакции $^{152}\text{Gd}(p, 4n)^{149}\text{Tb}$ [2]. Но содержание в природной смеси ^{152}Gd настолько мало (0.2%), что эта реакция не даёт возможности использования ^{149}Tb в клинических масштабах. Эти методы не являются эффективными, поэтому не применяются на практике.

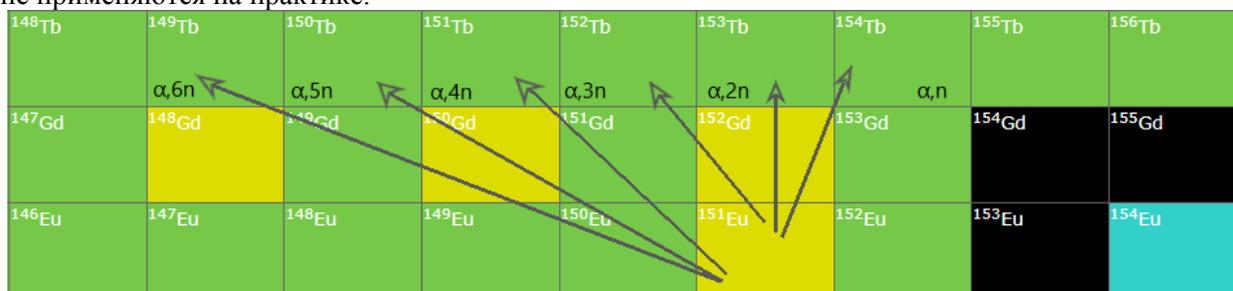


Рис. 1. Фрагмент нуклидной карты с возможными каналами реакции

Предложен метод получения изотопов тербия облучением тонкой мишени Eu_2O_3 пучком α -частиц, получаемым на циклотроне У-150 в НИЦ «Курчатовский институт». Для определения активности изотопов тербия использовали гамма-спектрометрию и альфа-спектрометрию. Рассчитаны активности и выходы продуктов ядерных реакций.

Литература

1. A. Koning, S. Hilaire, and S. Goliery. TALYS-1.8, A Nuclear Reaction Program, User Manual (The Netherlands, 2015).
2. C. Müller, K. Zhernosekov, U. Köster, K. Johnston, H. Dorrer, A. Hohn, N. T. van der Walt, A. Türler, and R. Schibli, J. Nucl. Med. 53, 1951 (2012).
3. Andrey G. Kazakov, Ramiz A. Aliev, Alexander Yu. Bodrov, Anna B. Priselkova. Separation of radioisotopes of terbium from a europium target irradiated by 27 MeV α -particles//Radiochim. Acta, V. 106, I. 2 P.135 (2017).

УДК 57.087.1

Задача локализации моторных функций в коре головного мозга с применением метода независимых компонент для устранения артефактов

П.Е. Жигулина¹, В.Л. Ушаков²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИЦ «Курчатовский институт»

Целью данной работы было изучение точности локализации моторных функций головного мозга человека при анализе фМРТ-данных, получаемых с применением метода независимых компонент для удаления физиологических и инструментальных артефактов и без применения. В качестве примера данных был взят простой модельный эксперимент: испытуемый в течение 30с сжимал кулак, потом 30с отдыхал, так продолжалось 9,5 минут, во время которых проводилось функциональное МР-сканирование его головного мозга на основе ЕРІ-последовательности (TR = 1000 мс, TE = 20 мс, 42 среза, размер воксела 2x2x2 мм³). Данные были получены на МР-томографе

Magnetom Verio 3T (Siemens, Германия) с использованием 32-канальной головной МР-катушки. Для испытуемого также были получены анатомические данные с высоким разрешением на основе T1-взвешенной последовательности (TR = 1900 мс, TE = 2,21 мс, 176 срезов, размер воксела 1x1x1 мм³). Обработка полученных данных функциональной МРТ проводилась в программе SPM12 (1).

Перед непосредственным анализом данных проводилась их предобработка, от которой напрямую зависит насколько качественная получится конечная картинка. Предобработка данных включала несколько шагов. Сначала нужно реориентировать изображения, соединив начало координат с передней комиссурой головного мозга с помощью функции Display. После этого необходимо избавиться от известных артефактов: 1) из-за неоднородности магнитного поля возникают геометрические искажения в функциональных изображениях, для минимизации этих эффектов используется функция FieldMap, алгоритм которой строит картину наиболее вероятных искажений по фазовому и магнитудному изображениям и устраняет их, 2) иногда попадаются «плохие» срезы, сильно выбивающиеся из общей последовательности, функция Art_slice из инструментов ArtRepair обнаруживает их и исправляет интерполяционными методами, 3) артефакты функциональных изображений, возникающие из-за неоднородности по времени устраняются с помощью функции Slice Timing, 4) артефакты движения из-за отсутствия фиксации головы испытуемого можно уменьшить с помощью функции Realign, которая оценивает 6 параметров (3 поступательных и 3 вращательных движения) и выравнивает изображения с помощью интерполяции. Далее необходимо нормализовать изображения, то есть отобразить в стандартное анатомическое пространство, чем занимается функция Normilise, которая сравнивает наши изображения с шаблонами из анатомического пространства, оценивает деформации и по этим оценкам производит отображение. Затем нужно наложить функциональные изображения на структурное с помощью функции Coregister. И последняя стадия предобработки – Smoothing: функция, уменьшающая ошибку за счет сглаживания шумов по Гауссу с ядром 8x8x8 мм³.

Для статистической обработки данных в SPM использовалась GLM модель (статистическая линейная модель):

$$Y = X * \beta + e,$$

где Y – полученные данные (функциональные изображения), X – прогнозы (design matrix), β – параметры, e – ошибка. Модель (Design matrix) описывается с помощью функции Specify 1-st level, именно здесь задаются все известные параметры эксперимента. Далее, оценивая β и e для всех стимулов, мы получаем T-распределение Стьюдента:

$$t = \beta / e$$

и для того, чтобы выделить значимые результаты, используем формулу T-статистики:

$$t = \frac{Y_1 - Y_2}{\sqrt{e_1^2 - e_2^2}},$$

где Y_1, Y_2 средний отклик по стимулам 1 и 2 соответственно. Значимыми считаются активности, для которых t больше критического значения с применением поправки на множественные сравнения FWE ($p = 0,05$). Оценку производит функция Estimate. В итоге можно увидеть, в каких областях локализованы значимые активности.

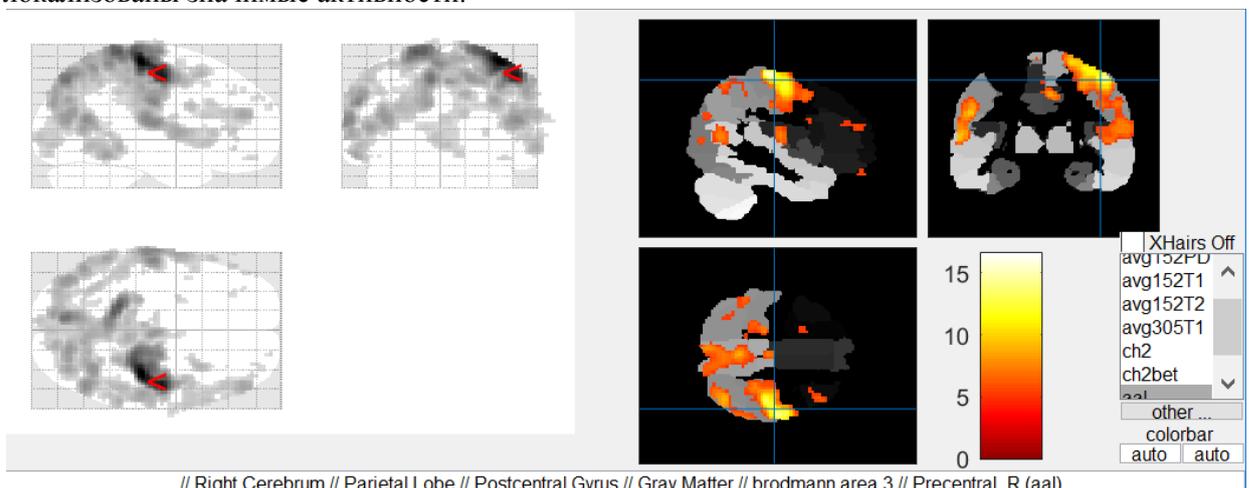


Рис.1. Показаны активности с критическим значением FWE $p = 0,05$ после стадий обработки, описанных выше.

Как видно из рис. 1 в данных много шума, от которого необходимо избавиться. Для этого был предложен еще один шаг обработки данных на основе применения метода независимых компонент в программе GIFT (2). Это еще один способ удаления артефактов после применения функции Realign. Алгоритмы программы позволяют оценить оптимальное количество независимых компонент, на которые можно разложить сигнал, и реализовать такое разложение. Удаление артефактов производится вручную: оценивают 3 дополняющие друг друга составляющие: пространственное расположение, временные ряды и спектральную плотность энергии, потом компоненты, которые ведут себя как шум, выбрасывают, а остальные складывают в новый, менее шумный сигнал.

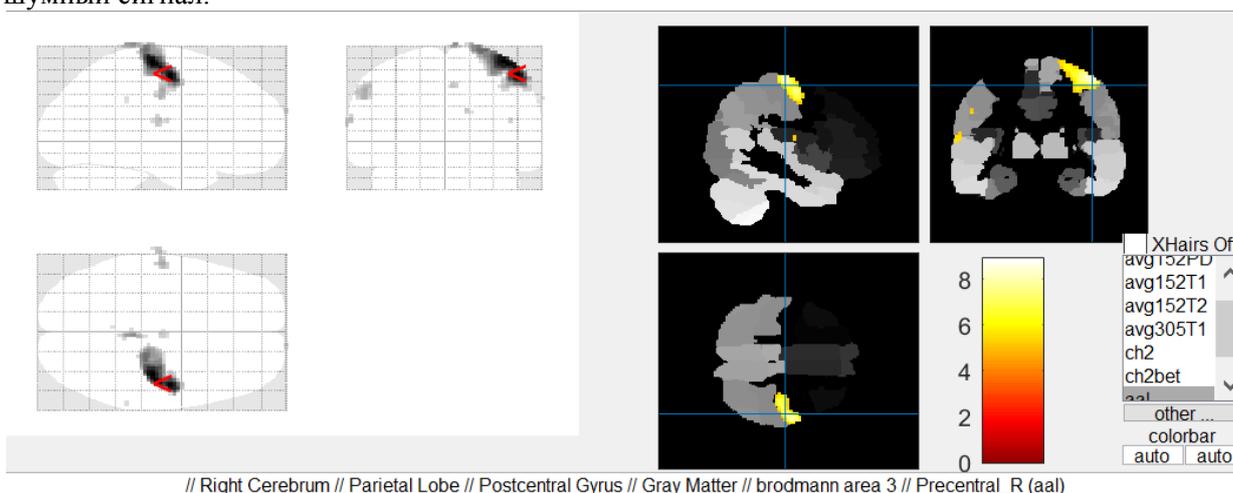


Рис.2. Показаны активности с критическим значением FWE $p = 0,05$ после дополнительного удаления артефактов с помощью программы GIFT.

Вывод: как видно при сравнении рис. 1 и 2 применение дополнительного шага очистки артефактов на основе метода независимых компонент дает возможность более точной локализации нейросетей, обеспечивающих когнитивные функции головного мозга на основе фМРТ данных.

Данная работа была частично поддержана грантом НИЦ «Курчатовский институт» (МР-совместимая полиграфия, приказ № 1649 от 11 июля 2018 года).

Литература

1. Ashburner J. et al. SPM12 Manual. <http://www.fil.ion.ucl.ac.uk/spm/>, 2017, 508c
2. Griffanti L., Douaud G., Bijsterbosch J., Evangelisti S., Alfaro-Almagro F., Glasser M. F., Duff E.P., Fitzgibbon S., Westphal R., Carone D., Beckmann C. F., Smith S. M. Hand classification of fMRI ICA noise components // NeuroImage, 2017, V.154, P.188-205.

УДК 539.199

Исследование циклической биомеханики модифицированных децеллюляризованных тканей

К.Г. Антипова^{1,2}, К.И. Луканина², С.В. Крашенинников², Т.Е. Григорьев², С.Н. Чвалун²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИЦ «Курчатовский институт»

В современном мире регенеративная медицина динамически развивается в условиях увеличения числа техногенных и климатических катастроф. Рост потребности в легкодоступных трансплантатах для восстановления нормального функционирования поврежденных тканей и органов ставит перед исследователями задачу создания искусственного клеточного каркаса. Такой тканево-инженерный каркас, заселенный клетками, послужит матрицей для формирования утраченного органа или его части.

Децеллюляризованная ткань - естественный экстрацеллюлярный матрикс - один из

широкого спектра материалов, которые используются в литературе для изготовления клеточных каркасов [1]. Главное преимущество децеллюляризированной ткани - сохранение морфологии нативной ткани, что обеспечивает быструю и аутентичную дифференциацию на ней клеточных культур. Основные недостатки использования этого материала в качестве каркаса – быстрый и неконтролируемый распад в условиях *in vivo* и, как следствие, недостаточная механическая прочность материала.

В связи с этим, для решения проблемы быстрого биоразложения материала предложена модификация децеллюляризированной ткани коллагеном II типа (Белкозин, Россия) с термической (до 105°C) и химической (глутаровым альдегидом) сшивками.

Предварительно образцы диафрагмы крыс [2] были лиофилизированы на установке Martin Christ Alpha 2-4LSC installation в течение 24 часов. Далее производилась модификация образцов с варьированием трех параметров: импрегнация коллагеном в течение 24 часов (0,5% (в/в) раствором коллагена в 2,0% уксусной кислоте (УК)/H₂O); тип сшивки (химическая – 2,5% глутаровым альдегидом в 2,0% УК/H₂O (в расчете 1,0% от веса полимера), термосшивка – выдерживание в вакуумном шкафу при 105°C в течении 24 часов после повторной лиофилизации; отсутствие сшивки. Условия замораживания образцов были следующие: направленный – на медном стержне в жидком азоте – и ненаправленный рост кристаллов растворителя – в рефрижераторе. После заморозки была произведена лиофилизация модифицированных образцов.

Полученные образцы были исследованы на разрыв на установке Instron 5982. Предварительно было произведено циклирование (5000 циклов, скорость 1,0 мм/мин).

В результате проведенных исследований не выявлено наличия явной зависимости механических свойств от типа сшивки децеллюляризированной диафрагмы, внесения дополнительного коллагена в образец и условий заморозки. Предположительно, это вызвано неоднородностью нативной ткани крысы, связанной с упорядоченной и ориентированной укладкой коллагеновых тяжей клеточного каркаса.

Работа выполнена при поддержке РФФИ №17-03-01361 А.

Литература

1. D. Steffens, D. I. Braghirolli, N. Maurmann, P. Pranke Drug discovery today. 2018
2. E. A. Gubareva, S. Sjoqvist, I. V. Gilevich, A. S. Sotnichenko, E. V. Kuevda, M. L. Lim, N. Feliu, G. Lemon, K. A. Danilenko, R. Z. Nakokhov, I. S. Gumenyuk, T. E. Grigoriev, S. V. Krashennnikov, A. G. Pokhotko, A. A. Basov, S. S. Dzhimak, Y. Gustafsson, G. Bautista, A. Beltrán Rodríguez, V. M. Pokrovsky, Ph. Jungebluth, S. N. Chvalun, M. J. Holterman, D. A. Taylor, P. Macchiarini Biomaterials. 2016, 77 (2016), 320.

УДК 004.91

Использование нейросетевых алгоритмов для решения задачи генерации лемм

Д.С. Власов², Н.А. Грибов¹, А.В. Грязнов², И.А. Молошиников², А.Г. Сбоев^{1,2}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

²Научный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В большинстве задач, связанных с естественными языками, приходится применять различные инструменты предобработки текстов. К одним из таких инструментов относится лемматизация. Лемматизация — это процесс приведения слова к нормальной форме, что позволяет в статистических моделях учитывать одно и то же слово в различных вариантах его написания.

Лемматизация является важным базовым шагом в процессе предварительной обработки текстов на естественном языке для дальнейшего анализа в различных прикладных задачах (определение тональности, классификации и т. д.). Наличие или отсутствие данного шага может существенно влиять на итоговую точность модели.

Существуют готовые решения, которые построены на различных методах: словарный (Pymorphy[2]), правила и регулярные выражения (Pattern [3]), машинное обучение (UDPipe[4], NLTK[5]) и другие. Точности готовых решений бывает недостаточно, что сказывается на общем результате в задачах обработки текстов на естественном языке, в связи с этим возникает необходимость построения собственного лемматизатора.

Как правило, модели, построенные методами машинного обучения, показывают наилучшие результаты. В качестве модели собственного лемматизатора было решено построить классическую sequence to sequence модель [6], когда новая последовательность символов генерируется на

основании входной последовательности символов. В качестве архитектуры модели (рис.1) выбрана двунаправленная рекуррентная сеть с долгой краткосрочной памятью BiLSTM. LSTM-модуль — это рекуррентный модуль сети, который обладает способностью помнить значения как на короткие, так и на длинные промежутки времени. Это достигается за счёт того, что LSTM-модуль не использует функцию активации внутри своих рекуррентных компонентов. Таким образом, значение, что хранится внутри, не размывается со временем в процессе тренировки сети. Для обучения такой модели лемматизатора на вход требуется подавать словоформу и её морфологический тэг.



Рис.1 Архитектура модели BiLSTM

В качестве данных для обучения были взяты материалы, предоставляемые в рамках соревнования CoNLL-2018. Полученные результаты (таблица 1) сравнивались с baseline результатами соревнований.

Таблица1. Сравнение результатов

Корпус	Точность (F1 метрика)	
	CoNLL 2018 baseline	Собственная модель
Африканский Afrikaans-AfriBooms	97.6	95.77
Латвийский Latvian-LTVB	92.0	92.66
Русский Russian-SynTagRus	95.9	96.92
Ирландский Irish-IDT	86.5	88.89
Галисийский Galician-CTG	97.0	98.54
Английский English-GUM	96.2	90.45
Французский French-Sequoia	97.8	92.08

Таким образом, при сравнительном анализе результатов наблюдается, что использование sequence to sequence модели для задачи генерации лемм подходит не для всех классов языков. Хорошие результаты были получены для языков, которые являются синтетическими и имеют флективный строй — русский, латвийский, ирландский. То есть те языки, у которых словообразование происходит за счёт присоединения к корню морфемы, которая несёт сразу несколько неразделимых значений (например, падеж, род, число и т. п.).

Для языков, имеющих отличный от флективного строй словообразования, модель работает неудовлетворительно. Это касается арабского языка, в котором формобразование слов происходит в основном путем внутреннего структурного изменения слова — внутренняя флексия, китайского языка, в котором словообразование осуществляется способами словосложения, и корейского языка, который является изолированным языком агглютинативного строя, когда словоизменение происходит путем приклеивания различных морфем, каждая из которых несёт только одно значение.

В заключении получена модель, которая достаточно точно выполняет задачу лемматизации для некоторых языков, в частности и русского. Для дальнейшего развития модели лемматизатора планируется:

- 1) сравнить подход решения данной задачи лучших участников соревнования CoNLL-2018 с собственным подходом;

- 2) использовать сети внимания attention in LSTM;
- 3) использовать продвинутые модели дистрибутивной семантики word2vec, elmo;
- 4) объединить методы машинного обучения и различные классические подходы (правила, регулярные выражения и т.д.).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, в рамках проект мол_a №18-37-00331.

Работа выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

Литература

1. Stemming and lemmatization, 2008 Cambridge University Press, <https://nlp.stanford.edu/IR-book/html/htmledition/stemming-and-lemmatization-1.html>
2. Korobov M.: Morphological Analyzer and Generator for Russian and Ukrainian Languages // Analysis of Images, Social Networks and Texts, pp 320-332 (2015).
3. De Smedt, T. & Daelemans, W. Pattern for Python. Journal of Machine Learning Research, 13: 2031–2035. (2012)
4. Milan Straka and Jana Straková. Tokenizing, POS Tagging, Lemmatizing and Parsing UD 2.0 with UDPipe. In Proceedings of the CoNLL 2017 Shared Task: Multilingual Parsing from Raw Text to Universal Dependencies, Vancouver, Canada, August 2017. <http://ufal.mff.cuni.cz/udpipe>
5. NLTK, NLTK 3.3 release: May 2018, <http://www.nltk.org>
6. Sutskever Ilya, Oriol Vinyals, Quoc V. Le, Sequence to Sequence Learning with Neural Networks, (Submitted on 10 Sep 2014 (v1), last revised 14 Dec 2014 (this version, v3)) <https://arxiv.org/abs/1409.3215>

УДК 004.912

Анализ текущих методов для решения задач эмотивно-тональной оценки текстов

А.В. Наумов, Д.В. Гудовских, А.А. Селиванов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной работе рассмотрены актуальные работы в области обработки естественного языка для решения задач эмотивно-тональной оценки текстов, выделены основные коллекции данных для русского и английского языков находящиеся в открытом доступе, а также описаны наиболее перспективные методы и наборы признаков, показавшие наилучший результат в последних соревнованиях по теме.

В последнее время наблюдается значительный рост интереса к автоматическому анализу тональности (sentiment analysis) и эмоций (affective analysis) в тексте. Это подтверждается последними исследованиями [1], [2] и проводимыми соревнованиями по анализу текста, такими как SentiRuEval-2016, WASSA-2017, SemEval-2018 и др. Популярность данных исследований определяется потребностью в анализе больших объемов социально значимой информации из интернет источников. Социальные сети, блоги и другие средства передачи информации в интернете стали настолько популярны и доступны, что поведение людей, их мнения, настроения и эмоции, выраженные в тексте, оказывают большое влияние на социально-экономическое поведение во всем мире. Кроме этого, потребность в автоматизированных средствах анализа текстовой информации из интернета, способные извлекать неявно выраженные данные об авторе или группе авторов, в настоящее время ощущается специалистами и аналитиками таких областей, как социология, экономика, психология и психолингвистика, криминалистика, политология, лингвистика и др.

В зарубежной литературе существует достаточно много исследований по анализу тональности текстов на английском языке, в частности с применением глубокого обучения [3]. Здесь получены современные результаты на различных корпусах данных, например, для задачи классификации тональности предложений по 5 классам на корпусе Stanford sentiment treebank лучшая точность в 54.7% показана в работе [4] с помощью применения языковой модели, обученной на символах слов. С другой стороны, задачи автоматического определения эмоций и их интенсивности ещё слабо исследованы. Так, на соревновании WASSA-2017 надо было определить величину интенсивности различных эмоций в тексте сообщения из социальной сети Twitter и посчитать их корреляцию с эталонными значениями. Лучший коэффициент корреляции Пирсона 0.75, показан в работе [5], где признаки исходного текста, основанные на векторном представлении слов и словарях эмоциональной лексики, подавались в ансамбль нейросетевых моделей, с

применением рекуррентных нейронных слоёв. В 2018 году задачи по определению тональности и величины интенсивности различных эмоций в тексте английского языка были подзадачами на соревновании SemEval-2018 Task 1. Метод [6] показал наилучший результат в этих подзадачах, он построен на ансамбле моделей градиентного бустинга и случайного леса. Признаки, использованные для обучения моделей, были получены с помощью трансферного обучения (transfer learning). Авторы брали современные модели глубокого обучения, предобученные на больших корпусах сторонних данных, и с их помощью извлекали признаки рассматриваемых текстов. Данное решение, в совокупности с использованием словарей эмоциональной лексики, позволило достичь state-of-the-art результата с коэффициентом корреляции Пирсона 0.799 для определения интенсивности различных эмоций и 0.84 для определения тональности текста.

Высокие результаты в задачах определения эмоций и их интенсивности в тексте обусловлены наличием размеченных наборов данных. К сожалению, появившиеся наработки в этой области для английского языка нельзя применить в похожих задачах на русском языке из-за того, что нет аналогичных наборов размеченных данных. В связи с этим, широкого круга исследований по применению методов машинного обучения к данным задачам не проводилось.

Для русского языка существуют исследования по определению тональности текста. Для решения этой задачи доступно два набора данных, представленных в рамках соревнований SentiRuEval 2015 и 2016 годов, а также корпус RuSentiment [7] см. в таблице 1. Для корпуса SentiRuEval 2015 лучший результат получен с помощью метода Gradient Boosting Classifier и векторного представления слов, основанного на модели skip-gram [8], а для корпуса SentiRuEval 2016 лучший результат представлен в работе [9], где нейросетевая модель глубокого обучения с рекуррентными слоями LSTM была обучена с использованием модели векторного представления слов word2vec. Корпус RuSentiment является самым большим из доступных, но на текущий момент есть только точности представленные авторами корпуса. Их модель основана на нейронной сети прямого распространения, входом которой являются вектора слов, полученные из модели векторного представления слов fastText.

Таблица 1. Данные корпусов на русском языке для анализа тональности

Название корпуса	Тип данных	Средняя длина текста	Тип разметки	Количество тренировочных примеров	Точность лучшего метода
SentiRuEval (2015)	отзывы о ресторанах и автомобилях	830	4 класса	418	Рестораны: F1-macro: 0.554 F1-micro: 0.824 Автомобили: F1-macro: 0.568 F1-micro: 0.742
SentiRuEval (2016)	сообщения из Твиттера о банках и телекоммуникационных компаниях (телеком)	83	5 классов	23 595	Банки: F1-macro: 0.57 F1-micro: 0.61 Телеком: F1-macro: 0.61 F1-micro: 0.74
RuSentiment (2018)	посты социальной сети Вконтакте	153	5 классов	28 218	F1: 0.73

Таким образом, анализ вышеизложенного позволяет сделать следующие выводы:

1. Целесообразно для анализа тональности использовать глубокие нейросетевые модели в сочетании с языковой моделью, обученной на символах слов;
2. Для задач эмотивного анализа перспективным является использование глубоких нейронных сетей, применение векторных представлений слов и словарей эмоциональной лексики;
3. Для получения значимых точностей в задачах эмотиво-тональной оценки текстов необходимо использовать выборки с количеством предложений не менее 4000.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-37-00398.

Литература

1. Cambria E. Affective computing and sentiment analysis // IEEE Intelligent Systems. 2016. V. 31, P. 102-107.
2. Kratzwald B., Ilić S., Kraus M., Feuerriegel S., Prendinger H. Deep learning for affective computing: Text-based emotion recognition in decision support // Decision Support Systems. 2018.
3. Zhang L., Wang S., Liu B. Deep learning for sentiment analysis: A survey // Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery. 2018. P. e1253.
4. Peters M., [et al.]. Deep contextualized word representations // arXiv preprint arXiv:1802.05365. 2018.
5. Goel P., Kulshreshtha D., Jain P., Shukla KK. Prayas at emoint 2017: An ensemble of deep neural architectures for emotion intensity prediction in tweets // InProceedings of the 8th Workshop on Computational Approaches to Subjectivity, Sentiment and Social Media Analysis. 2017. P. 58-65.
6. Duppada V., Jain R., Hiray S. SeerNet at SemEval-2018 Task 1: Domain Adaptation for Affect in Tweets // arXiv preprint arXiv:1804.06137. 2018.
7. Rogers A. [et al.]. RuSentiment: An Enriched Sentiment Analysis Dataset for Social Media in Russian // InProceedings of the 27th International Conference on Computational Linguistics. 2018. P. 755-763.
8. Loukachevitch N. [et al.]. SentiRuEval: testing object-oriented sentiment analysis systems in Russian // In Proceedings of International Conference Dialog. 2015. V. 2, P. 3-13.
9. Sboev A. [et al.]. Deep Learning Network Models to Categorize Texts According to Author's Gender and to Identify Text Sentiment // InComputational Science and Computational Intelligence (CSCI), 2016 International Conference on. IEEE. 2016. P. 1101-1106.

УДК 612.821

Поиск психофизиологических коррелятов агентивности в активно-пассивной парадигме

А.С. Яшин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Цель данной работы состояла в экспериментальном обнаружении психофизических и психофизиологических коррелятов агентивности – чувства авторства действия, в том числе при выполнении человеком активно-пассивного движения – движения, совершаемого испытуемым совместно с машиной. Для выполнения этой задачи использовалось устройство для поднятия пальца (см. рис.), с помощью которого были реализованы четыре различных типа движения, в разной степени вовлекавших испытуемого в совершаемое действие: активные движения (Act) выполнялись только испытуемым; активно-пассивные движения (ActPas) инициировались испытуемым и далее реализовывались сервоприводом; пассивные движения (Pas) осуществлялись только сервоприводом при наличии пальца испытуемого в держателе; также имелось пассивное наблюдение за движением муляжа пальца (Dum). Эксперимент состоял из двух этапов, включавших по четыре серии, каждой серии соответствовал один тип движения. Новизна исследования заключалась в рассмотрении вышеупомянутого активно-пассивного движения и в целенаправленном характере совершаемого действия, которое могло быть успешным или неуспешным в зависимости от выполнения задачи. Рассмотрение сложных целенаправленных движений является важным шагом в исследованиях агентивности.

Звуковые сигналы (75 дБ) двух типов предъявлялись через псевдослучайно чередуемые интервалы времени 300, 400 и 500 мс. В условиях Act и ActPas задача испытуемого состояла в том, чтобы после предъявления звукового сигнала коснуться держателем (6) верхней части контактной пластины (7) (см. рис.). В остальных условиях это же «здание» выполнялось только сервоприводом. Во всех условиях успешными (далее «S» – «success») считались попытки, в которых касание происходило быстрее заданного порога времени. Они подкреплялись зажиганием светодиода (5) и звуком консонансного аккорда. Если порог превышался («F» – «failure»), светодиод не зажигался и звучал диссонансный аккорд. Эксперимент представлял собой факторный план 4x2: 4 градации активности (фактор активности) и 2 варианта результативности попыток (фактор успешности). Во всех условиях, кроме условия Act, успешные пробы сопровождалась ускоренным, а неуспешные – замедленным срабатыванием сервопривода. В условии Act успешность задавалась пороговым критерием, определяемым индивидуально. Варьированием этих параметров в каждом условии по отдельности достигалось соотношение S/F, равное 70:30%. После каждой пробы регистрировалось время в мс, которое, по мнению испытуемого, прошло с момента поднятия пальца (или муляжа) до начала предъявления звука. В литературе [1] известен феномен преднамеренного связывания: субъективные оценки времени укорачиваются относительно реальных интервалов, если испытуемый считает себя автором движения, но этот вывод был сделан только при

рассмотрении полярных ситуаций – при полном участии или неучастии человека, в то время как в данном исследовании была создана более тонкая градация вовлеченности. Перед экспериментом испытуемому в рамках контрольной серии предъявлялись оба типа звуков, чтобы исключить влияние физических параметров звука на результаты. Во время эксперимента регистрировалась ЭЭГ с помощью 64-канальной установки actiCHamp (использовалось 28 электродов), а также вертикальная и горизонтальная ЭОГ и ЭМГ. В исследовании участвовали 20 здоровых испытуемых (средний возраст 23,45 лет).

В качестве кандидатов на роль коррелятов агентивности выступали как поведенческий индикатор – субъективные оценки времени между движением и звуком обратной связи, так и электрофизиологические индикаторы – слуховой компонент N1 и компонент P3. Для уточнения результатов использовался опрос испытуемых, в котором требовалось оценить пользу, предсказуемость и комфорт при выполнении активно-пассивных и пассивных движений.

В случае субъективных оценок с помощью Post-hoc анализа были выявлены различия между условием Act и остальными ($p < 0.001$), а также различия между условиями Pas/S и Pas/F ($p < 0.014$). Первый факт подтверждает существование преднамеренного связывания, но позволяет предположить, что оно не различает более тонкие градации агентивности. Второй факт говорит в пользу важности результата действия для возникновения чувства авторства и дополняет более ранние результаты [2]. Опрос испытуемых показал разницу по шкале «Польза» для фактора активности ($F(1,19)=8.3$; $p=0.01$), успеха ($F(1,19)=124.18$; $p < 0.001$) и при взаимодействии этих факторов ($F(1,19)=10.43$; $p=0.004$), Post-hoc обнаружил разницу в субъективном восприятии между неудачными попытками в ActPas и Pas сериями ($p < 0.001$), неудачи при условии Pas воспринимались более нейтрально. Также успешные попытки в целом воспринимались как более полезные ($F(1,19)=124.18$; $p < 0.001$) и комфортные ($F(1,19)=13.178$; $p=0.002$).

Из-за методологических различий в проведении серий условие Act далее не учитывалось при анализе. Перед усреднением ERP данные были подвергнуты фильтрации в полосе 0,1 – 15 Гц. Рассмотрим результаты анализа слуховых ERP. Каждый индивидуальный ERP был усреднен по области интереса (ROI) с максимальной выраженностью компонента N1 – это оказались отведения FCz, FC1, FC2, FCz, Cz. Различия условий оказались в целом значимы только по фактору успешности ($F(1,19)=22.65$, $p=0.00014$). Post-hoc подтвердил значимость различий между всеми парами S-F. Судя по уровням значимости (ActPas $p=0.000009$; Pas $p=0.00994$; Dum $p=0.00022$), успешность более значимо влияла на латентности N1 в серии ActPas. В Act серии значимых различий не было обнаружено. Для анализа компонента P3 были взяты разностные амплитуды, полученные как разность средних значений в пределах регионов ± 25 мс от минимума компонента N2 и максимума компонента P3. По самой высокой разностной амплитуде в качестве ROI были выбраны отведения FCz, FC1, FC2, Cz. Подтвердились различия по фактору активности ($F(2,18)=16.71$, $p < 0.0001$). Post-hoc подтвердил различия условия ActPas от остальных ($p < 0.0001$). Условия Pas и Dum не различались значимо между собой.

В результате проведенного эксперимента было заключено, что разностная амплитуда компонента P3 и латентности слухового N1 претендуют на роль коррелятов агентивности, но окончательно подтвердить это должны дальнейшие исследования. Субъективные оценки времени оказались малоинформативными, что делает еще основательнее давно поставленный вопрос о том, в какой мере они отражают чувство авторства и какой именно его аспект.

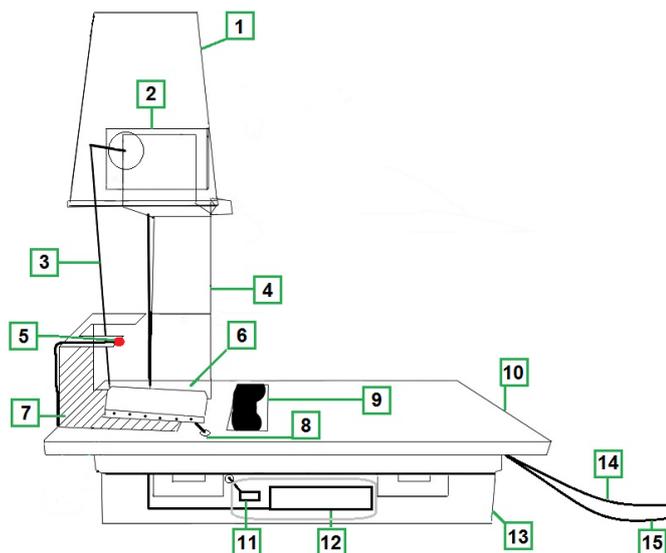


Рис. 1. Эскиз устройства для поднятия пальца. 1 – непрозрачный кожух; 2 – сервопривод; 3 – гибкая тяга; 4 – штатив; 5 – светодиод; 6 – держатель пальца; 7 – контактная пластина; 8 – тяга ретрактора; 9 – ремешок для фиксации кисти руки; 10 – платформа; 11 – ретрактор; 12 – плата сервопривода; 13 – корпус; 14 – кабель питания; 15 – интерфейсный кабель связи с компьютером.

Литература

1. Engbert K., Wohlschläger A., Haggard P. Who is causing what? The sense of agency is relational and efferent-triggered //Cognition. – 2008. – Т. 107. – №. 2. – С. 693-704.
2. Dubynin I. A., Shishkin S. L. Feeling of agency versus judgment of agency in passive movements with various delays from the stimulus //Psychology in Russia. State of the Art. – 2017. – Т. 10. – №. 3.

УДК 54.057

Получение волокнистых материалов на основе коллагена методом электроформования

Е.В. Нестеренко

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Производился подбор оптимальных условий получения волокнистого материала методом электроформования на основе коллагена в растворе уксусной кислоты с добавлением волокнообразующей добавки РЕО (полиэтиленоксид). На основании известных данных наиболее оптимальным является 6% раствор уксусной кислоты, позволяющий не допустить денатурацию коллагена при комнатной температуре. На данный момент необходимо подобрать минимальную концентрации РЕО для получения волокон. На электронном микроскопе были получены изображения образцов. Концентрации веществ в используемых растворах и соответствующие им фотографии с электронного микроскопа представлены ниже:

- А) 2,2% collagen + 6% AC + 0,4% РЕО
- В) 2,2% collagen + 6% AC + 0,5% РЕО
- С) 2,2% collagen + 6% AC + 0,6% РЕО

Как можно судить по изображениям, во всех трех случаях наблюдается устойчивое волокнообразование, но присутствуют капли. При более низкой концентрации волокнообразующей добавки капли чаще и крупнее, что свидетельствует о необходимости увеличения концентрации РЕО.

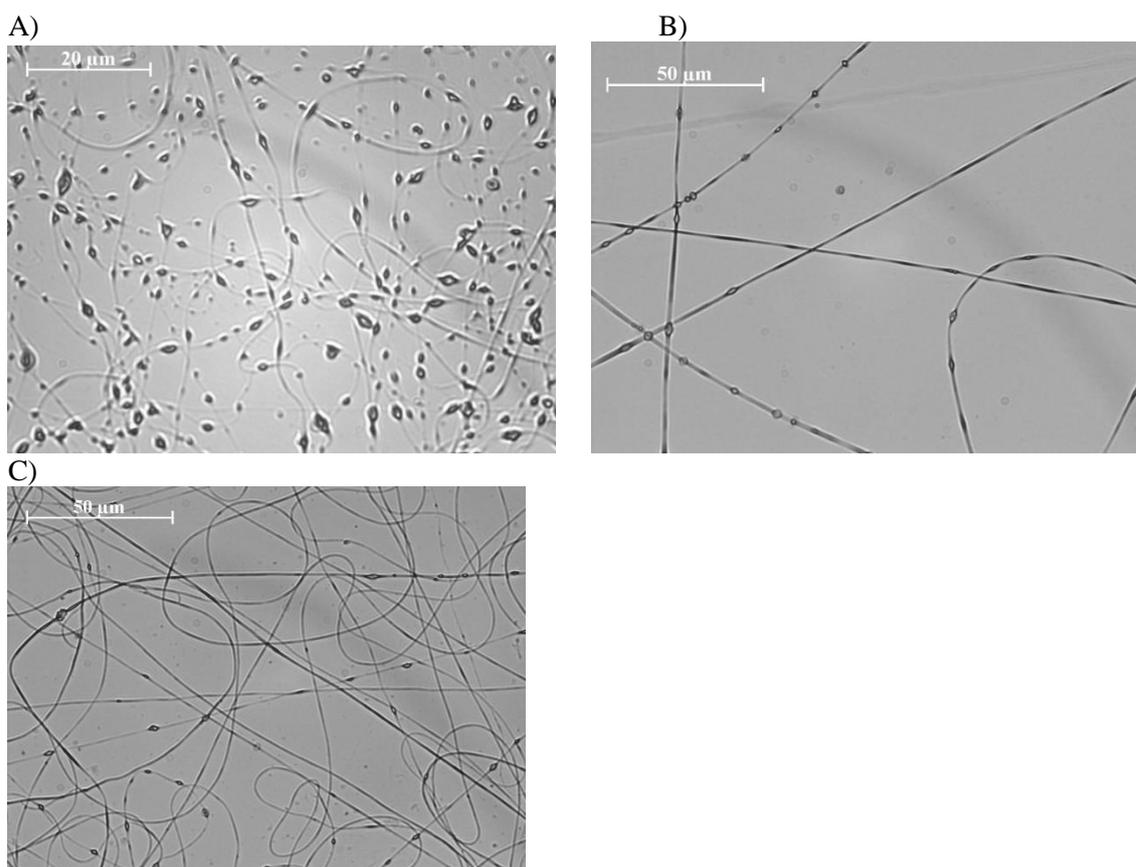


Рис. 1. Микрофотографии волокнистого материала на основе коллагена, полученные при помощи электронного микроскопа при концентрациях А) 2,2% collagen + 6% AC + 0,4% PEO, В) 2,2% collagen + 6% AC + 0,5% PEO, С) 2,2% collagen + 6% AC + 0,6% PEO

Литература

1. Chenggui Sun, Cagri Ayranci, Yu Chen, Yaman Boluk. Can Extensional Flow Rupture Macromolecules in an Electrospinning Process. JOURNAL OF POLYMER SCIENCE, PART B: POLYMER PHYSICS 2017, 55, 1051–1054.

УДК 608

Коагулятор с вращающейся электроискровой дугой

В.О. Лебедева

Московский физико-технический институт (государственный университет)

На данный момент существуют несколько типов коагуляторов, такие как электроискровой коагулятор и аргоноплазменный коагулятор (спрей-коагулятор). Целью работы является создание экспериментальной установки нового типа коагулятора, главной задачей которого будет бесконтактное воздействие на ткань. Принцип работы установки заключается в термическом воздействии плазменного столба на поверхность ткани, площадью около 1 кв. см. Чтобы получить такую площадь коагуляции, необходимо обеспечить стабильный плоскостной разряд, что невозможно. Поэтому я предлагаю формировать площадь из множества дуговых разрядов, проходящих между двумя электродами. На рис. 1 показана схема узла, позволяющего вращать электроды, тем самым создавая поверхность в форме круга. Для дополнительной фокусировки дугового разряда между электродами располагается диэлектрическая насадка, обеспечивающая явление стелющегося разряда. Установка состоит из узла вращения, маломощного двигателя, электрической схемы и трех аккумуляторов по 12 вольт. Параметры электрической схемы (рис. 2) подобраны так, чтобы обеспечить напряжение пробоя между электродами при безопасном для человеческого организма значении тока (до 5 мА) и высокой частоте искрения для обеспечения равномерной коагуляции. Также были проведены эксперименты с биологической тканью (рис. 3), которые показали работоспособность данного метода. Во время проведения эксперимента дуга

меняла траекторию движения (рис. 3, а), б)) и мы наблюдали разряд, стелющийся по поверхности ткани. С помощью данной установки на разных режимах можно коагулировать область в 1 кв. см, отрезок до 1 см в длину и точку, находясь на расстоянии до 5 мм от ткани, что позволяет сократить риск повторного кровотечения. Дешевые детали обеспечивают низкую себестоимость прибора относительно конкурентов на рынке. Большая, чем у других типов коагуляторов площадь воздействия позволяет сократить время проведения операции. Благодаря возможности питания электрической схемы от аккумуляторов, установка является мобильной, что позволяет использовать ее в полевых условиях, а также в скорой помощи.

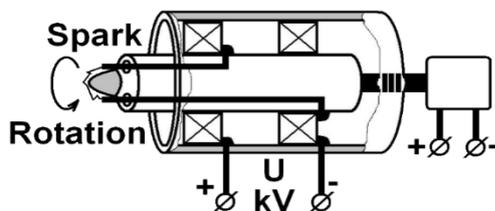


Рис. 1. Схема узла вращения

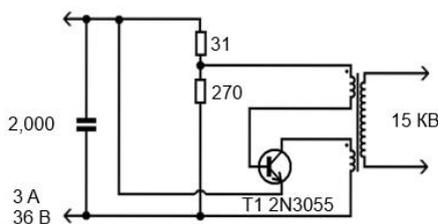


Рис. 2. Электрическая схема

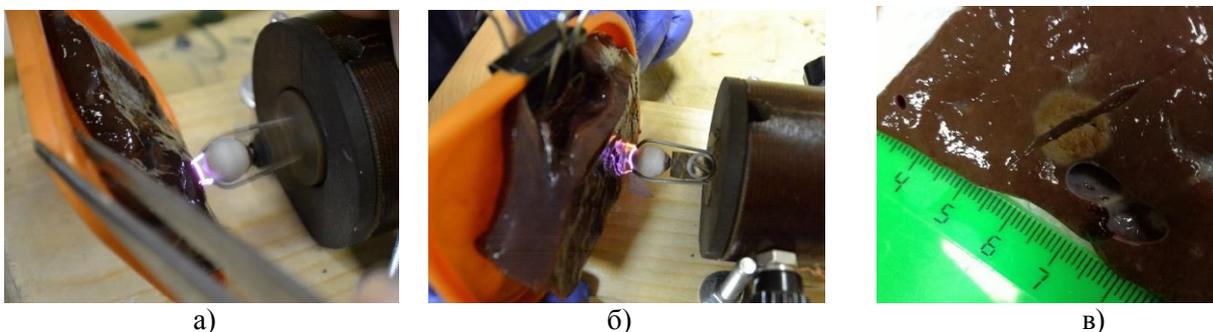


Рис. 3. Эксперименты с биологической тканью (свиная печень): а), б) смена траектории дуги, в) результат коагуляции при воздействии в течении 5 с.

Литература

1. Семенов Г. М. Современные хирургические инструменты. СПб: Питер, 2006. 352 с.
2. Лебедева В.О. Сжатие электроискрового разряда атмосферой и внешним диэлектриком / Сборник тезисов: 59-я Всероссийская научная конференция МФТИ с международным участием в честь 65-летия образования МФТИ и 70-летия образования Физико-технического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова. – Москва-Долгопрудный-Жуковский: Изд. МФТИ, 2016.
3. ГОСТ 21240-89. Скальпели и ножи медицинские. Общие технические требования и методы испытаний
4. Farin G., Grund K.E. Technology of argon plasma coagulation, with particular regard to endoscopic application // Endosc. Surg. – 1994. – Vol. 2. – P. 71–77.

УДК 616-006.441

Обнаружение прогностических геномных маркеров неходжинских лимфом

С.С. Саенко¹, Д.А. Королева², С.В. Цыганкова¹, Е.С. Булыгина¹, А.В. Недолужко¹

¹НИЦ «Курчатовский Институт»
²ФГБУ «НМИЦ гематологии» Минздрава России

Неходжкинские лимфомы (НХЛ) представляют гетерогенную группу злокачественных опухолей лимфопролиферативной системы (в настоящее время правильнее говорить иммунной системы), которые отличаются друг от друга клиническими, морфологическими, иммунофенотипическими характеристиками, прогнозом развития заболевания и ответом на химиотерапию, являясь, по сути, разными типами злокачественных опухолей.

В связи с высоким разнообразием типов лимфом и из-за отличий в течение болезни, требуется скрупулезная диагностика и отличающиеся методы лечения. В настоящее время описаны лимфомы, не требующие оперативного вмешательства на протяжении долгих лет, другие же наоборот протекают с угрожающей скоростью.

Неходжкинские лимфомы делят на несколько классов: агрессивные, вялотекущие и высокоагрессивные. Современная диагностика НХЛ проводится на основании изучения морфологии части опухоли, полученной с помощью биопсии. В ходе этого анализа используются цитологические, гистологические и иммуногистохимические методы, которые, однако, не дают 100% точности. Поэтому разработка молекулярно-биологических и генетических маркеров и описание изменений молекулярных путей в тканях этого типа лимфом является важным направлением для диагностики и лечения НХЛ.

В рамках данного исследования 20 пациентам с ЛКМ из российской популяции было выполнено секвенирование экзонов (2-11) гена *TP53*. Впервые в России было проведен анализ взаимосвязи наличия мутации в гене *TP53* с ответом на терапию и неблагоприятным прогнозом ЛКМ. В 25% (5/20) случаев обнаружены мутации в гене *TP53* (5, 6, 7 экзоны). Методом FISH (флуоресценция in situ) у 3/5 пациентов с мутацией в гене *TP53* была одновременно выявлена del17p (del+mut+), а у 2/5 была обнаружена только мутация (del-mut+). У одного пациента (1/20) была выявлена del17p, без наличия мутации в гене *TP53* (del+mut-). Таким образом, значимой корреляции между выявлением del17p и мутации в гене *TP53* получено не было. В отличие от наличия del17p, обнаружение мутации в гене *TP53* значимо ассоциировано с отсутствием ответа на терапию и быстрой прогрессией заболевания.

Литература

1. Лорие Ю.Ю., Лимфома из клеток мантийной зоны: клинические формы, морфологические варианты, диагностика и лечение. Диссертация кандидата медицинских наук. 2009 год.
2. Haige Ye1, Aakash Desai, Dongfeng Zeng, Krystle Nomie, Jorge Romaguera, Makhdum Ahmed and Michael L. Wang Ye et al. Smoldering mantle cell lymphoma. Journal of Experimental & Clinical Cancer Research (2017) 36:185
3. Hoster E, Dreyling M, Klapper W, Gisselbrecht C, van Hoof A, Kluin-Nelemans HC, Pfreundschuh M, Reiser M, Metzner B, Einsele H, Peter N, Jung W, Wörmann B, Ludwig WD, Dührsen U, Eimermacher H, Wandt H, Hasford J, Hiddemann W, Unterhalt M; German Low Grade Lymphoma Study Group (GLSG); European Mantle Cell Lymphoma Network. A new prognostic index (MIPI) for patients with advanced-stage mantle cell lymphoma. Blood. 2008 Jan 15;111(2):558-65
4. Christian W. Eskelund, Christina Dah, Jakob W. Hansen, Maj Westman, Arne Kolstad, Lone B. Pedersen, Carmen P. Montano-Almendras, Simon Husby, Catja Freiburghaus, Sara Ek, Anja Pedersen, Carsten Niemann, Riikka Rty, Peter Brown, Christian H. Geisler, Mette K. Andersen, Per Guldborg, Mats Jerkeman and Kirsten Gronbaek. TP53 mutations identify younger mantle cell lymphoma patients who do not benefit from intensive chemoimmunotherapy. Blood, 2017.

УДК 51-76, 577.38

Об идентификации типа возбудимости нейрона по отклику на импульсную стимуляцию

А.В. Параскевов^{1,2}, Т.С. Земскова^{2,1}

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Численно исследован спайковый отклик нейрона в модели Моррис-Лекара (ML) [1, 2] при его стимуляции одним импульсом тока в зависимости от формы импульса. ML-модель выбрана потому, что она достаточно реалистично описывает временной профиль спайка и, в зависимости от своих параметров, демонстрирует как первый, так и второй тип возбудимости по Ходжкину (рис. 1,

слева). Для каждой формы импульса построена кривая реобазы - зависимость минимальной амплитуды иницирующего спайк импульса от параметра, определяющего длительность этого импульса. Показано, что, как и для модели нейрона Ходжкина-Хаксли [3], при условии непрерывности восходящей части стимулирующего импульса наличие локального минимума на кривые реобазы для ML-модели характерно исключительно для второго типа возбудимости (рис. 1, справа). Это позволяет предложить использование кривой реобазы в качестве альтернативного маркера типа возбудимости реального нейрона. Такой маркер никак не связан со стимуляцией нейрона постоянным током, поэтому способствует гораздо лучшему пониманию биологической значимости типов возбудимости нейрона. В частности, он показывает, что нейроны второго типа возбудимости могут избирательно реагировать на сравнительно слабые единичные импульсные стимулы, в то время как нейроны первого типа возбудимости на это принципиально не способны.

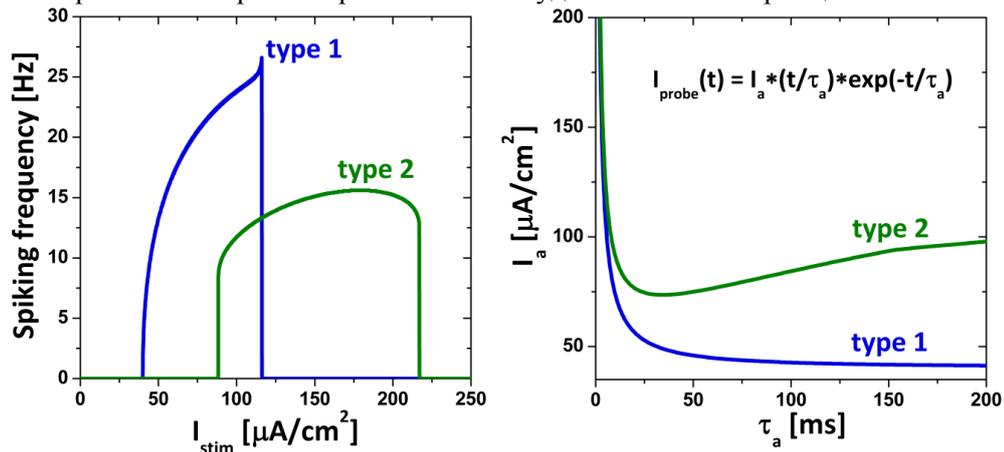


Рис. 1. Результаты численных экспериментов с моделью Моррис-Лекара (ML). Слева: Зависимости частоты периодической генерации спайков ML-нейроном от величины постоянного стимулирующего тока I_{stim} для двух наборов параметров, определяющие 1-й и 2-й тип возбудимости (непрерывное и скачкообразное начало генерации спайков, соответственно). Справа: Кривые реобазы $I_a(\tau_a)$ для стимулирующего импульса $I_{probe}(t)$ в виде т.н. альфа-функции при разных типах возбудимости ML-нейрона. Обратите внимание, что минимум кривой реобазы для 2-го типа возбудимости заметно меньше минимального значения постоянного тока I_{stim} , при котором возникает периодическая генерация спайков. Параметры ML-модели для обоих типов возбудимости взяты из [2].

Литература

1. Morris C., Lecar H. Voltage oscillations in the barnacle giant muscle fiber // Biophys. J. 1981. V. 35 (1). P. 193-213.
2. Rinzel J., Ermentrout B. Analysis of neural excitability and oscillations // Koch C., Segev I. (Eds.) Methods in neuronal modeling: From synapses to networks (2nd Ed., MIT Press, 1998), P. 251-291.
3. Paraskevov A. The rheobase curves of a single impulse of conductance for the Hodgkin-Huxley model of different excitability classes // Bernstein Conference 2015. (DOI: 10.12751/nncn.bc2015.0078)

УДК 577.32

Применение методов компьютерного моделирования для оценки аффинности связывания производных тразолола в активном центре имидазол глицерофосфат дегидратазы

В.И.Тимофеев^{1,2}, Ю.К. Аганова¹

¹ НИЦ «Курчатовский Институт»

² ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Имидазол глицерофосфат дегидратаза – это фермент, принимающий участие в биосинтезе гистидина. Данный фермент необходим для жизнедеятельности болезнетворных бактерий, в частности, возбудителя туберкулеза – *Mycobacterium tuberculosis*. Таким образом, ингибиторы данного фермента могут служить основой для разработки инновационных антитуберкулезных препаратов. Ранее было показано, что некоторые производные тразолола могут ингибировать гомологичные ферменты, исходя из этого было сделано предположение, что эти же производные или их близкие аналоги могут служить и ингибиторами имидазол глицерофосфат дегидратазы из *Mycobacterium tuberculosis*, и построены модели комплексов фермента и производных тразолола. В

настоящей работе методом молекулярной динамики показана стабильность полученных комплексов. Кроме того, рассчитано изменение свободной энергии, сопровождающее образование каждого из комплексов. Исходя из полученных данных выбраны наиболее привлекательные для дальнейшей работы производные тразолола, в частности, сделаны предположения по модификации данных производных для улучшения их свойств как ингибиторов фермента.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 18-34-00876.

УДК 577.32

Применение молекулярного докинга для построения моделей комплексов имидазол глицерофосфат дегидратазы с рядом производных тразолола

Ю.К. Аганова¹, В.И. Тимофеев^{1,2}

¹НИЦ Курчатовский Институт

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Имидазол глицерофосфат дегидратаза (ИГД) из *Mycobacterium tuberculosis* (Mt) катализирует шестую стадию биосинтеза гистидина – превращение имидазол глицерофосфата в имидазол ацетолфосфат. ИГД относится к ферментам, необходимым для жизнедеятельности и роста туберкулёзной бактерии *Mycobacterium tuberculosis*, таким образом, ингибиторы данного фермента могут быть использованы как основа для разработки противотуберкулезных лекарств. Было показано, что некоторые производные тразолола являются эффективными и высокоселективными ингибиторами растительных ИГД. Исходя из высокой степени гомологии активных центров растительных и бактериальных ИГД, представляет интерес изучить возможность связывания ИГД Mt данных соединений или их аналогов. В настоящей работе методом молекулярного докинга получены комплексы ИГД Mt с некоторыми производными тразолола и описано их аминокислотное окружение в активном центре фермента.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 18-34-00876.

УДК 577.32

Поиск новых ингибиторов имидазол глицерофосфат дегидратазы с использованием виртуального скрининга

А.А. Талызина^{1,3}, В.И. Тимофеев^{2,3}, Ю.К. Аганова²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²НИЦ Курчатовский Институт

³Объединённый институт высоких температур РАН

Имидазол глицерофосфат дегидратаза из *Mycobacterium tuberculosis* (IGPD) принимает участие в биосинтезе гистидина. IGPD отнесена к числу 50-ти целевых белков, перспективных для разработки антитуберкулёзных препаратов, поскольку этот фермент необходим для роста и выживания патогенной бактерии. Пространственная структура IGPD определена в апо-форме, в комплексе с субстратом и тразололом – обратимым ингибитором фермента и может быть использована для поиска новых высокоселективных ингибиторов фермента методом виртуального скрининга. В настоящей работе для поиска ингибиторов IGPD была использована одна из самых полных баз данных органических молекул – ZINC. Найденные ингибиторы ранжировались согласно оценочной функции докинга. Для 100 молекул из начала списка была произведена оценка их растворимости, а также безопасности для млекопитающих. В итоге выбрано 5 наилучших по данным параметрам кандидатов, которые могут быть использованы для разработки на их основе инновационных противотуберкулезных препаратов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 18-34-00876.

Исследование природы и свойств дефектов в нитриде титана, полученного с помощью аддитивных технологий

А.С. Ильин¹, А.В. Павликов^{1,2,3}, Е.А. Константинова^{1,2,3,4}

¹Физический Факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова,

²ФГУП ВНИИ Оптико-физических измерений

³НИЦ Курчатовский Институт

⁴Московский физико-технический институт (университет)

Аддитивные технологии в настоящее время развиваются благодаря широким возможностям сравнительного дешевого получения изделий и структур. Одним из эффективных методов получения аддитивных изделий является лазерное спекание [1,2].

В данной работе были изучены природа и свойства дефектов в нанокристаллическом нитриде титана, полученном с помощью лазерного спекания. Спекание титанового порошка проводилось в специальной камере при избыточном давлении азота с использованием Nd:YAG лазера. Подробно методика синтеза образцов описана в [3]. Парамагнитные дефекты в полученных образцах были исследованы методом ЭПР-спектроскопии с помощью ЭПР-спектрометра Bruker ELEXSYS-500 (рабочая частота 9,5 ГГц, чувствительность $5 \cdot 10^{10}$ спин/Гс). Освещение образцов осуществлялось непосредственно в резонаторе спектрометра с помощью ртутной лампы Bruker ER 202 UV (мощность 50 Вт) в широком спектральном диапазоне (270–900 нм). Измерения проводились в широком температурном интервале от 30 до 300 К с использованием системы температурного контроля Bruker ER 4112 HV. Для расчета концентрации парамагнитных центров использовался эталон $\text{CuCl} \cdot (2\text{H}_2\text{O})$ с известным количеством спинов

На рис.1а представлены спектры ЭПР образцов нитрида титана, измеренные в темновых условиях и при наличии освещения. Как следует из представленных данных, спектр ЭПР имеет сложную структуру, поэтому для правильной интерпретации результатов требуется компьютерное моделирование. С помощью компьютерной симуляции полученного спектра были получены следующие значения g – тензора и тензора сверхтонкого взаимодействия (СТВ): $g_1 = 2.0041$, $\Delta H_1 = 3.3$ Гс; $g_2 = 2.0028$, $\Delta H_2 = 1.9$ Гс; $g_3 = 2.0021$, $\Delta H_3 = 2.7$ Гс и, соответственно, $A_1 = 1.9$ Гс, $A_2 = 3.1$ Гс, $A_3 = 32.1$ Гс. Сигнал ЭПР с данными анизотропными параметрами согласно литературным источникам [4] может быть приписан парамагнитным центрам, представляющим собой атомы азота (спин ядра $I = 1$) с неспаренным электроном (N-радикалы).

Кроме того, анализ показывает, что при освещении амплитуда сигнала ЭПР увеличивается (рис.1а). Это, в свою очередь, указывает на увеличение концентрации парамагнитных центров. Рассчитанная нами концентрация N-центров в исследуемых образцах составила $N_s = 8 \cdot 10^{16}$ см⁻³ в темноте и $N_s = 1.8 \cdot 10^{17}$ см⁻³ при освещении в течение 5 минут. Эффект освещения был обратим. Об этом свидетельствует измеренная нами кинетика релаксации амплитуды сигнала ЭПР (рис.1б). Обратимость эффекта освещения можно объяснить перезарядкой N-радикалов. Действительно, до освещения в образце, вероятно, присутствуют как парамагнитные центры (содержащие неспаренный электрон), так и непарамагнитные (содержащие два спаренных электрона). При освещении происходит фотовозбуждение электронов с непарамагнитных центров, оставшиеся дефекты представляют собой центры с одним электроном, т.е. становятся парамагнитными, что и приводит к росту амплитуды сигнала ЭПР и концентрации N-центров, соответственно (рис.1б). После прекращения освещения происходит обратный процесс – захват фотовозбужденных электронов парамагнитными дефектами и переход их в непарамагнитное состояние.

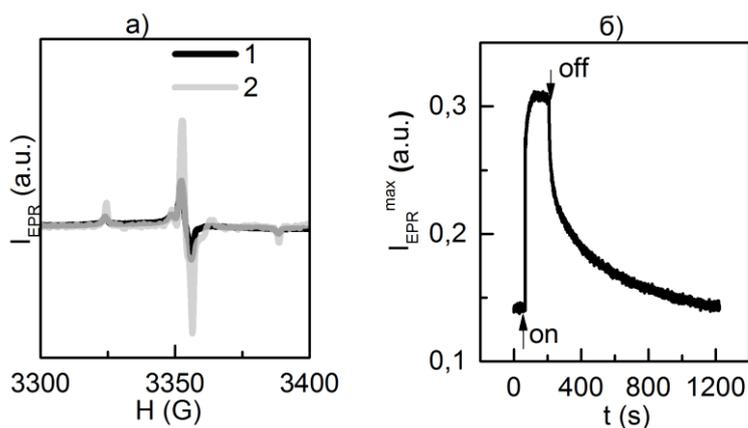


Рис. 1. а) Спектр ЭПР нитрида титана, полученного путем лазерного спекания, в темноте (черный) и при освещении (серый). б) Вариация амплитуды сигнала ЭПР в цикле темнота-освещение-темнота. Стрелками показаны моменты включения и выключения освещения.

Таким образом, с помощью ЭПР диагностики радикалов в режиме «in situ» было установлено, что основным типом парамагнитных центров в нанокристаллическом нитриде титана, полученном методом лазерного спекания, являются атомы азота с неспаренным электроном (N-радикалы). Обнаружено, что при освещении образцов происходит увеличение концентрации указанных дефектов примерно в два раза. Данный эффект имеет обратимый характер, что свидетельствует о процессах перезарядки N-центров. Полученная информация может быть полезна для разработки технологических покрытий на основе полученных образцов.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения соглашения №14.625.21.0041 от 26.09.17 (уникальный идентификатор RFMEFI62517X0041).

Литература

1. Babakova E.V. et al. Comparison of Activation Technologies Powder ECP-1 for the Synthesis of Products Using SLS // Appl. Mech. and Mater. 2015. V. 756. P. 220-224.
2. Гуреев Д.М., Ружечко Р.В., Шишковский И.В. Исследование условий селективного лазерного спекания керамических порошковых материалов системы цирконата--титаната свинца // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. № 6, С. 84-89.
3. Шишковский И.В. Синтез функциональных изделий из градиентных материалов методом селективного лазерного спекания // Перспективные материалы. 2001. №5. С.60-64.
4. Tarasov A., Minnekhanov A., Trusov G., Konstantinova E.A., Zyubin A., Zyubina T., Sadovnikov A., Dobrovolsky Y., Goodilin E. Shedding light on aging of n-doped titania photocatalysts // J. Phys. Chem. C. 2015. V. 119. P. 18663-18670.

УДК 537.9

Влияние отжига на структуру и оптические свойства композитов на основе поли-пара-ксилилена и сульфида свинца

Л.Н. Овешников^{1,2}, А.А. Несмелов¹, С.А. Завьялов¹, А.Ю. Вдовиченко¹, Я.В. Зубавичус¹,
А.С. Орехов¹, С.Н. Чвалун¹

¹ НИЦ «Курчатовский Институт»

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Создание композитов на основе полимерной матрицы мотивировано, в первую очередь, возможностью совмещения уникальных механических свойств полимера с различными функциональными свойствами филлера, зависящими от выбранного материала. При этом, свойства включений неорганической компоненты могут существенно отличаться от свойств объемного материала как за счет размерного эффекта, так и за счет особенностей их взаимодействия с матрицей. В настоящей работе исследовались тонкие пленки композита на основе поли-пара-ксилилена (ППК) и сульфида свинца (PbS), полученные методом полимеризации из газовой фазы на поверхности [1]. Осаждение неорганических материалов при криогенных температурах,

осуществляемое в данном методе, часто сопровождается образованием кластеров с неравновесной структурой, определяющей их функциональные свойства. Структура и свойства итогового композита зависят от множества факторов, включая условия синтеза и способы постростовой обработки (например, отжиг в вакууме).

На рентгеновских дифрактограммах исходных пленок ППК-PbS видны существенно уширенные пики, которые нельзя однозначно связать с равновесной кубической фазой PbS. Результаты спектроскопии поглощения рентгеновского излучения показывают существенное уменьшение длин связей Pb-S в исследуемых пленках. Подобное изменение указывает на возможное присутствие низкомолекулярных кластеров (PbS)_n, которые, в соответствии с теоретическими расчетами, оказываются довольно стабильными в рассмотренном диапазоне температур [2]. При отжиге пленок на дифрактограммах появляются отчетливые пики, характерные для нанокристаллического PbS. Подобное поведение указывает на то, что отжиг пленки может индуцировать агломерацию и рекристаллизацию включений PbS.

Повышение содержания PbS приводит к красному сдвигу спектров оптического поглощения, что можно связать с увеличением характерных размеров наночастиц. Аналогичный сдвиг края поглощения при отжиге можно также интерпретировать как укрупнение наночастиц PbS, что согласуется с структурными данными. Построена зависимость энергии в характеристических точках спектра поглощения от температуры отжига. Проведена оценка изменений размеров наночастиц при отжиге в рамках трех моделей квантово-размерных поправок. Сравнение показывает, что наиболее подходящей является модель гиперболической зоны [3]. Проведена оценка влияния возможных микрокристаллических напряжений на полученные значения размеров в режиме простого линейного отклика. Показано, что в рассматриваемом диапазоне энергий поправки данного рода незначительны.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 18-33-00911).

Литература

1. Григорьев Е.И., Завьялов С.А., Чвалун С.Н. ГПП синтез поли-п-ксилилен-металл (полупроводник) наноконпозиционных материалов для химических сенсоров // Российские нанотехнологии. 2006. Т. 1, С. 58.
2. Koirala P., Kiran B., Kandalam A.K., Fancher C.A., de Clercq H.L., Li X., Bowen K.H. Structural evolution and stabilities of neutral and anionic clusters of lead sulfide: Joint anion photoelectron and computational studies // J. Chem. Phys. 2011. V. 135. P. 134311.
3. Wang Y., Suna A., Mahler W., Kasowski R. PbS in polymers. From molecules to bulk solids // J. Chem. Phys. 1987. V. 87. P. 7315.

УДК 543.67

Синтез, структура и электрофизические свойства наноконпозитов поли-п-ксилилен – серебро

Д.А. Сахартов¹, А.Ю. Вдовиченко^{1,2}, Л.Н. Овешников^{1,3}, Б.А. Аронзон^{1,3}, С.Н. Чвалун^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт»

²Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

³Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Осуществили синтез наноконпозитов по следующей методике: в высоком вакууме (10⁻⁵ торр) сублимировали исходный прекурсор – пара-циклофан при температуре 60-90 °С, затем он, попадая в зону пиролиза, разлагался на мономер – пара-ксилилен при 650 °С. Мономер осаждали на подложки, охлажденные до температуры жидкого азота, одновременно с парами металла, получаемыми резистивным испарением. Далее разогревали метастабильный соконденсат ПК и Ag, и он самопроизвольно полимеризовался, образуя наноконпозит. Более подробно методика синтеза описана в работе [1].

В процессе синтеза конпозитов In situ в камере роста измеряли сопротивление плёнок при нагревании от температуры -195 °С до комнатной. Исследовали образцы с концентрациями серебра выше и ниже порога протекания. Сопротивление всех образцов менялось очень значительно и с непостоянными скоростями во всем диапазоне температур, в котором проводились измерения, для большинства образцов характерно немонотонное изменение сопротивления, а также резкое падение

сопротивления при температуре около $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$, что связано с несколькими конкурирующими эффектами при формировании композита.

Методами просвечивающей электронной микроскопии провели исследования структуры образцов. Анализ изображений показал, что наночастицы распределены в матрице равномерно, со средним диаметром 15 нм.

С целью определения механизма проводимости была исследована температурная зависимость сопротивления образцов при повторном нагревании, а также проводимость при комнатной температуре на переменном токе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-33-00911).

Литература

1. *Григорьев Е.И., Завьялов С.А., Чвалун С.Н.* ГПП синтез поли-п-ксилилен-металл (полупроводник) нанокпозиционных материалов для химических сенсоров // *Российские Нанотехнологии 2006*. Т. 1. С. 58-70.

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ И ФИЗИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Председатель: А.Л. Барабанов
Зам. председателя: М.В. Зверев
Секретарь: А.Ю. Строев

Дата: 21.11.2018

Время: 15:40

Место: Москва, ул. Максимова, д. 4, ауд.
27

УДК 537.222.22

Моделирование влияния облучения высокоэнергетическими нейтронами и гамма-квантами на характеристики МОП-транзистора

М.А. Петухов¹, А.И. Рязанов^{1,2}

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Разработана количественная модель накопления радиационно-индуцированного заряда в объёме и на поверхности слоя диэлектрика МОП-транзистора, учитывающая влияние генерации точечных радиационных дефектов. В модели учитывается генерация электронно-дырочных пар под действием ионизирующего излучения, начальная рекомбинация, диффузия и дрейф образовавшихся свободных носителей заряда, захват дырок ловушками в объёме диэлектрика, рекомбинация захваченных дырок и свободных электронов и высвобождение ионов водорода из гидрогенизированных дефектов при захвате дырок, а также генерация точечных дефектов при облучении высокоэнергетическими нейтронами. Образовавшиеся в ходе нейтронного облучения кислородные вакансии играют роль ловушек для свободных носителей заряда. Высвободившиеся в ходе облучения ионы водорода переносятся к границе раздела диэлектрик-полупроводник, где депассивируют поверхностные состояния (ПС). Кинетика свободных носителей заряда в слое оксида кремния в диффузионно-дрейфовом приближении описывается системой кинетических уравнений:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_c - \nabla J_n - k_5 n C_{TH}^+ - k_6 n C_T^+, \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_c - \nabla J_p - (k_1 + k_2) p C_{TH}^0 - k_3 p C_T^0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial H^+}{\partial t} = -\nabla J_{H^+} + k_2 p C_{TH}^0 - k_4 H^+ C_T^0, \quad (3)$$

$$\frac{dC_{TH}^+}{dt} = k_1 p C_{TH}^0 + k_4 H^+ C_T^0 - k_5 n C_{TH}^+, \quad (4)$$

$$\frac{dC_{TH}^0}{dt} = -k_2 p C_{TH}^0 + k_5 n C_{TH}^+, \quad (5)$$

$$\frac{dC_T^+}{dt} = k_3 p C_T^0 - k_6 n C_T^+, \quad (6)$$

$$\frac{dC_T^0}{dt} = k_2 p C_{TH}^0 - k_4 H^+ C_T^0 + G_d, \quad (7)$$

где n , p , H^+ – концентрации электронов, дырок и ионов водорода (протонов) соответственно, $C_{T,TH}^{0,+}$ – концентрации ловушек в различных состояниях, отличающихся зарядом и гидрогенизацией, G_c – скорость генерации электронно-дырочных пар, G_d – скорость генерации ловушек, k – константы скоростей реакций, J_{n,p,H^+} – потоки свободных носителей заряда. Система уравнений (1-7), дополненная выражениями для потоков свободных носителей заряда в диффузионно-дрейфовом приближении и уравнением Пуассона для электростатического потенциала, решается численно. При моделировании процесса зарядки ПС учитывается значение поверхностного потенциала на границе раздела диэлектрик-полупроводник, которое находится путём численного решения соответствующего уравнения.

Распределение заряда в слое подзатворного диэлектрика и на границе раздела диэлектрик-полупроводник, рассчитанное в результате моделирования, позволяет найти сдвиг порогового напряжения МОП-транзистора [1]. При приложенном напряжении исток-сток модель позволяет найти значение тока утечки и построить стоко-затворную характеристику транзистора в условиях облучения потоком гамма-квантов или при отсутствии облучения.

При облучении МОП-транзистора высокоэнергетическими нейтронами в слое диоксида кремния образуются каскады атомных столкновений, в результате чего возрастает концентрация точечных радиационных дефектов. Нейтральные кислородные вакансии, захватывая дырки, образуют E' -центры (то есть $O_3 \equiv Si \bullet$), за счёт чего увеличивается концентрация ловушек в объёме диэлектрика [2]. В работе представлен метод оценки скорости генерации точечных дефектов для двухкомпонентной системы. Полученные значения скорости генерации кислородных вакансий используются в уравнении (7) при моделировании нейтронного облучения.

Результаты моделирования стоко-затворной характеристики МОП-транзистора находятся в хорошем соответствии с данными эксперимента [3] для необлученного транзистора, для прибора, подвергнувшегося воздействию гамма-излучения от источника на основе ^{60}Co , а также для прибора, облучённого потоком нейтронов со средней энергией ~ 1 МэВ и сопутствующих гамма-квантов в условиях ядерного реактора бассейнового типа (рис. 1). Таким образом, модель может использоваться для расчёта стоко-затворной характеристики прибора, подвергающегося воздействию облучения высокоэнергетическими нейтронами и сопутствующими гамма-квантами.

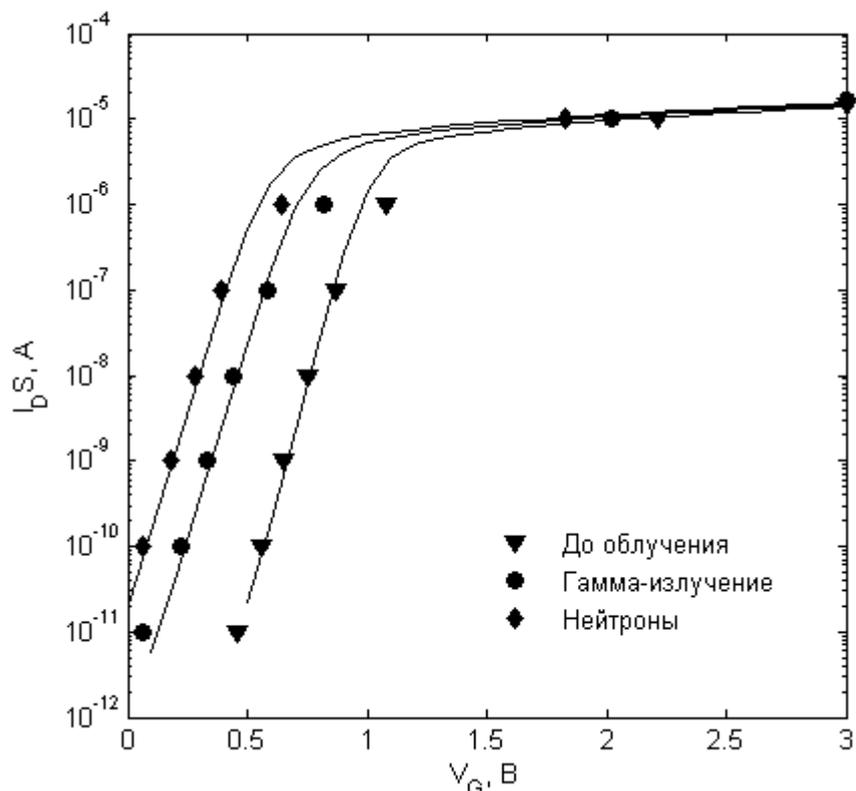


Рис. 1. Стоко-затворная характеристика n -канального МОП-транзистора в необлученном состоянии, после облучения высокоэнергетическими гамма-квантами до дозы 183 крад и нейтронами с энергией 1 МэВ до флюенса $5 \cdot 10^{14}$ н·см⁻² (линии – результаты численного моделирования, \blacktriangledown , \bullet , \blacklozenge - экспериментальные результаты [12]).

Литература

1. *Petukhov M.A., Ryazanov A.I.* Modeling of radiation-induced charge trapping in MOS devices under ionizing irradiation // *Phys. Atom. Nucl.* 2016. V. 79. P. 1571.
2. *Marshall C.D., Speth J.A.* Induced optical absorption in gamma. neutron and ultraviolet irradiated fused quartz and silica // *J. Non-Cryst. Solids.* 1997. V. 212. P. 59.
3. *Vaidya S.J., Sharma D.K., Chandorkar A.N.* Neutron induced oxide degradation in MOSFET structures // *Proceedings of 10th IPFA.* 2003. P. 159.

УДК 535.371/372

Спектры и кинетика фотолуминесценции квантовых точек селенида кадмия, внедренных в жидкокристаллическую полимерную матрицу

А.В. Елопов¹, О.Н. Карпов²

¹Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

²Институт нефтехимического синтеза имени А.В.Топчиева РАН

Жидкокристаллические полимерные (ЖКП) нанокомпозиты, содержащие квантовые точки (КТ), привлекли повышенное внимание в качестве объектов исследования, так как особенности их строения позволяют создать слоистую упорядоченную матричную структуру с высокой концентрацией КТ. Наиболее ощутимым преимуществом использования подобных структур является возможность снизить негативное влияние Оже-рекомбинации, что позволит добиться усиления излучения в такой среде [1]. Другой особенностью таких нанокомпозитов оказалось то, что ЖКП позволяет модифицировать зонную структуру КТ, менять упорядоченность КТ и свойства матриц приложением электрического поля или изменением температуры. В связи со всем выше перечисленным подобные наноструктуры оказываются перспективными в области создания устройств оптической генерации [2]. Однако влияние полимерной структуры на излучение КТ

требует дальнейшего изучения. Данная информация может быть получена из анализов спектров фотолюминесценции (ФЛ) нанокompозитов с КТ.

В ходе работы нами были изучены золь CdSe, смектические нанокompозиты на основе 4-(ω -акрилоилоксигексилокси)бензойной кислоты с алифатической цепочкой с $n=6$ (БК-6ПА) с разными массовыми долями КТ CdSe: 5, 10, 15 и 30%, а также нанокompозит на основе близкого по структуре аморфного полимера на основе 3-(ω -акрилоилоксигексилокси)бензойной кислоты ПМБК-6А. Исследования фотолюминесцентного спектра проводились при возбуждении образцов излучением лазера Ekspla 2143A, длина волны 372 нм, частота следования импульсов 10 Гц, длительность импульсов 25 пс, плотность энергии импульса на образце не превышала 3 мДж/см². Регистрация спектров ФЛ проводилась спектрометром Princeton Instrument Acton 2500i с ПЗС-матрицей с усилителем, обеспечивающим регистрацию спектров ФЛ с временным разрешением. Спектры возбуждения ФЛ снимались с помощью спектрометра Perkin Elmer LS 55

Спектр ФЛ нанокompозитов, содержащих КТ, состоит из двух широких полос (рис. 1). Первая из них с максимумом на длине волны 582 нм может быть связана с экситонной рекомбинацией в КТ. Полоса же ФЛ в области 650-850 нм, по-видимому, является следствием наличия электронных состояний на поверхности КТ и возникновением связей между КТ и полимерной структурой [3]. Косвенным подтверждением последнего является резкое увеличение интенсивности длинноволновой полосы в ЖКП нанокompозите по сравнению с золем КТ. В ЖКП образцах относительная интенсивность ФЛ этой полосы возрастает с уменьшением доли КТ. Обе полосы ФЛ возникают при возбуждении с длинами волн в диапазоне 300-550 нм.

Зависимость интенсивности ФЛ от энергии возбуждающих импульсов оказалась линейной во всех образцах во всем диапазоне измеренных энергий, как для экситонного пика, так и для длинноволновой полосы.

С целью более полного изучения люминесцентных свойств были исследованы кинетики ФЛ спектров всех образцов (рис. 2). Для обеих полос зависимость сигнала ФЛ от времени хорошо аппроксимируется суммой двух спадающих экспонент с временами жизни 40-60 нс и 150-350 нс для экситонного пика, 90-160 нс и 430-610 нс для длинноволновой полосы. В ЖКП нанокompозитах прослеживается уменьшение времен жизни ФЛ при увеличении концентрации КТ, что, возможно, указывает на относительный рост эффективности излучательной рекомбинации

Сравнение кинетики ФЛ для нанокompозитов КТ в ЖКП и аморфном полимере показывает, что при одинаковой массовой доле КТ сигнал ФЛ в последнем в 6 раз слабее, чем в ЖКП. Времена жизни ФЛ в нанокompозите на основе ЖКП при этом оказываются в 1.5 раза больше для экситонной и в 2 раза больше для длинноволновой полосы. Данные эффекты указывают на снижение эффективности безызлучательной рекомбинации в нанокompозите на основе ЖКП.

Таким образом, показано, что использование ЖКП матрицы позволяет увеличить квантовый выход ФЛ по сравнению с аморфным полимером. Увеличение концентрации КТ приводит к росту доли экситонной рекомбинации ФЛ.

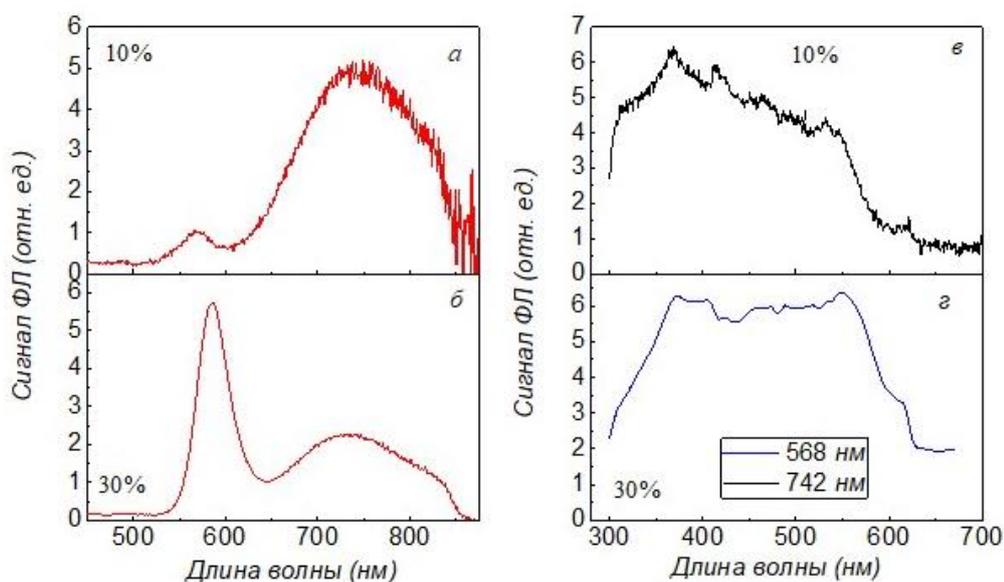


Рис. 1. Спектры ФЛ нанокompозитов КТ в ЖКП матрице БК-6ПА с массовым содержанием КТ 10% (а) и 30% (б) при возбуждении излучением с длиной волны 372 нм. Спектры возбуждения ФЛ, измеренной на

длине волны 742 нм в образце с массовой долей КТ 10% (в) и на длине волны 586 нм в образце с массовой долей КТ 30% (г).

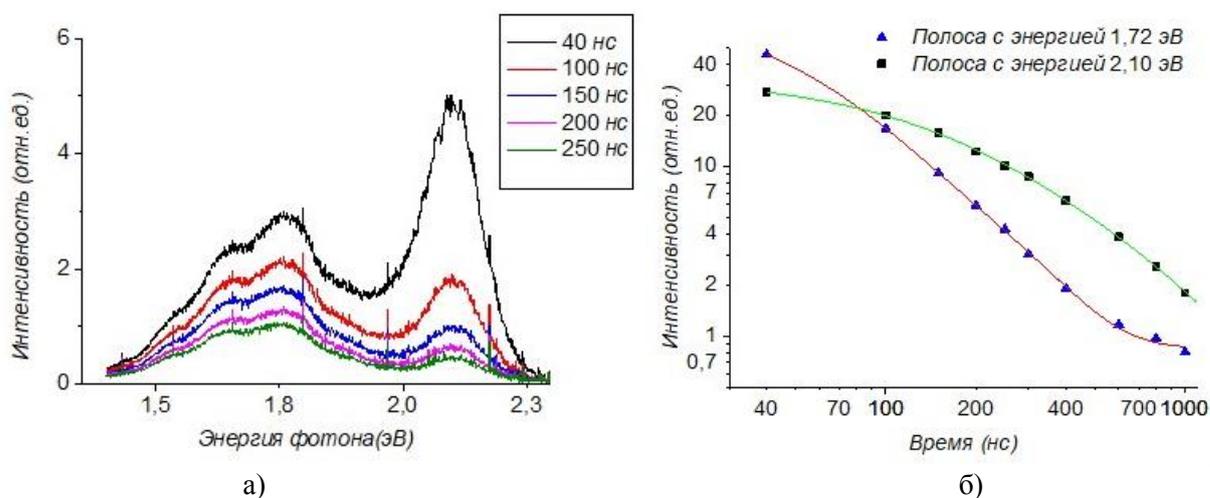


Рис 2. а) Спектры ФЛ нанокompозита на основе ЖКП, содержащего 30% масс. КТ на различных временах после действия лазерного импульса. б) Зависимости сигналов экситонной и длинноволновой полос ФЛ от времени.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-02-00548

Литература

1. V.I. Klimov // Los Alamos Science, 2003, V. 28, P. 214-220.
2. В.А. Герасин и др. // Успехи химии, 2013, V.82(4), P.303-332
3. L. Hu et al. // Physical Chemistry, 2012, V.116(20), P. 11283-11291
4. G. Tselikov et al. // Chemphyschem, 2015, V. 16(5), P.1071-1078.

УДК 539.123

Возможности измерения нейтринной силы отдачи с помощью микромеханических резонаторов

А.Л. Барабанов^{1,2}, О.А. Титов¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

В реакции захвата электрона ядром выделяется энергия, которая распределяется между электронным нейтрино, ядром отдачи и энергией возбуждения дочернего атома. Приобретаемая ядром отдачи кинетическая энергия незначительна, поэтому радиоактивные атомы, находящиеся в образце, остаются в нём после распада. Вероятность взаимодействия нейтрино с образцом крайне мала, поэтому нейтрино уносят из образца энергию и импульс. В результате на радиоактивный образец может действовать макроскопическая сила отдачи. Эта сила определяется импульсом, уносимым нейтрино в единицу времени; направление уносимого импульса зависит от углового распределения нейтрино. Если нейтрино испускаются изотропно, то сила равна нулю. В слабых взаимодействиях не сохраняется пространственная чётность, поэтому если исходные радиоактивные ядра поляризованы, то угловое распределение нейтрино анизотропно [1] и на образец действует ненулевая сила отдачи.

Авторы работы [2] оценили силу отдачи, действующую на образец, при условии, что ядра атомов, неустойчивых к электронному захвату, подвергаются поляризации в сильном магнитном поле при низкой температуре. Эта сила оказалась сравнимой с теми, которые измеряются современными атомно-силовыми микроскопами. Эти же авторы рассмотрели возможности использования этого метода для определения массы нейтрино [3].

В работах [2], [3] рассмотрен лишь случай гамов-теллеровского перехода с уменьшением спина ядра на единицу. При этом не было использовано явное выражение для асимметрии вылета нейтрино по отношению к вектору спина ядра, захватывающего электрон (соответственно, сила

отдачи была получена с точностью до численного множителя). Более точное выражение нейтринной силы отдачи, обусловленной чистыми гамов-теллеровскими переходами (с увеличением или уменьшением спина ядра на единицу), было получено в [4].

В настоящей работе приведена формула для силы отдачи в произвольном разрешённом переходе (как фермиевском, так и гамов-теллеровском) с учётом углового распределения нейтрино, испускаемого в процессе захвата электрона поляризованным ядром. Выполнена численная оценка сил отдачи для изотопов, распадающихся преимущественно по каналу электронного захвата.

Рассмотрены возможности измерения силы отдачи от нейтринного излучения с помощью микромеханических устройств, например кантилеверов. При указанном подходе непосредственно измеряется отклонение кантилевера, а вызвавшая его сила определяется из закона Гука. Показано, что измерение сил отдачи масштаба 10^{-12} Н методом, предложенным в [2], возможно только при высокой степени поляризации ядер. Предложен дополнительный способ измерения силы, основанный на методах магнитно-резонансной силовой микроскопии. Иницируя осцилляции поляризации ядер (а следовательно и пропорциональной ей силы отдачи) на частоте, равной собственной частоте микромеханического резонатора, можно добиться резонанса, при котором амплитуда отклонения возрастает в Q раз, где Q - добротность резонатора. Данный метод позволяет повысить чувствительность измерений и регистрировать силы отдачи порядка 10^{-19} Н.

Литература

1. *Treiman S.B.* Recoil effects in K capture and beta decay // *Phys. Rev.* 1958. V. 110. P. 448-450.
2. *DeAngelis C., Folan L.M., Tsifrinovich V.I.* Generation and monitoring of directed neutrino beams using electron-capture β -decay sources // *Phys. Rev. C.* 2012. V. 86. P. 034615.
3. *Folan L.M., Tsifrinovich V.I.* Generation of a directed mono-energetic neutrino beam and measurement of the neutrino mass // *Mod. Phys. Lett. A.* 2014. V. 29. P. 1430042.
4. *Барabanов А. Л., Тутов О. А.* // Сила отдачи от нейтринного излучения при захвате электронов поляризованными ядрами // *Ядерная физика и инжиниринг.* 2017. Т. 8. № 3. С. 242–245.

УДК 548.73

Изменение свойств перовскита $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_{3-x}$ в тонких пленках

В.О. Зорина¹, Х. Рубио-Зуазо²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²ESRF (European Synchrotron Radiation Facility)

Перовскиты - это группа материалов, обладающих свойствами сверхпроводимости, магнитосопротивления, электронной и кислородной проводимостью (ионной), что обуславливает их широкое применение в микроэлектронике и телекоммуникациях. Перовскиты обладают хорошими транспортными свойствами и используются в качестве катодов для твердо-оксидных топливных элементов. Также, к примеру, изменения электрических свойств подобных материалов может увеличить или уменьшить сопротивление, что важно для использования их в качестве проводников. В случае, если данный материал был выращен в виде тонкой пленки, изменения его свойств можно достичь несколькими способами: созданием стресса из-за эпитаксиального осаждения, образованием кислородных вакансий с помощью нагревания, изменением стехиометрических коэффициентов, фазовыми переходами. В данной работе приведены результаты исследования с применением первых двух механизмов.

Была рассмотрена тонкая пленка $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_{3-x}$, эпитаксиально выращенная на субстрате SrTiO_3 толщиной 52 нм. Для исследования материала были использованы два метода: рентгеновская дифракция (X-Ray Diffraction) и фото-электронная спектроскопия при высоких энергиях излучения (Hard Energy PhotoElectron Spectroscopy). Первый способ был нужен для того, чтобы исследовать структуру образца, второй - для определения изменения валентности марганца, что впоследствии использовалось для подсчета количества кислородных вакансий.

Образец был исследован в трех состояниях: 1) начальном ($x=0$); 2) при нагревании в течение 30 минут при температуре 500 градусов Цельсия; 3) при нагревании в течение 30 минут при температуре 640 градусов Цельсия. Нагревание пленки проводилось для того, чтобы образовать кислородные вакансии. По результатам работ, была обнаружена новая периодическая структура в тонкой пленке перовскита $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_{3-x}$ для третьего наблюдаемого состояния вещества, когда количество кислородных вакансий достигло 7%. Дальнейшее нагревание образца привело к

разрушению периодической структуры подложки и осажденного перовскита.

В ходе эксперимента было проведено сравнение с предыдущими исследованиями, в которых описан аналогичный по строению и методу получения образец, но вместо катиона стронция использовался катион кальция. Было обнаружено, что в данном материале ($\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_{3-x}/\text{SrTiO}_3$ (20 нм)) новая периодическая структура наблюдается только при достижении числа кислородных вакансий в 10%, и при дальнейшем нагревании происходило полное исчезновение старой структуры вещества, что отличается от изменений, происходящих при нагревании в тонкой пленке $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_{3-x}/\text{SrTiO}_3$.

Литература

1. *J. Rubio-Zuazo, L. Onandia, P. Ferrer., and G.R. Castro* Correlation between the electronic and atomic structure, transport properties, and oxygen vacancies on $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ thin films // *Appl. Phys. Lett.* 104, 021604 (2014)

УДК 537.213

Влияние процессов образования пространственного заряда на электрофизические свойства монокристалла алмаза

А.А. Алтухов¹, С.А. Львов¹, М.Г. Ситников²

¹ООО «ПТЦ «УралАлмазИнвест»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Алмазный датчик альфа-излучения представляет собой алмазную пластину с напыленными электродами, к которым приложено напряжение смещения [1]. Попадая в алмаз, частицы разменивают свою кинетическую энергию на образование электронно-дырочных пар и останавливаются на расстоянии в несколько десятков микрометров. Получившиеся носители заряда дрейфуют в электрическом поле по направлению к электродам, создавая импульс электрического тока, площадь которого пропорциональна энергии частицы. Важной характеристикой работы датчика является эффективность сбора заряда.

В данной работе обнаружено уменьшение эффективности сбора заряда по мере увеличения количества зарегистрированных частиц и обнаружены импульсы обратной полярности при выключении напряжения смещения.

На основе предположения о накоплении в пластине пространственного заряда в рамках одномерной электростатической модели удалось объяснить наблюдаемые закономерности. Также было исследовано влияние кратковременного облучения пластины со снятым напряжением смещения на восстановление эффективности сбора заряда.

Литература

1. *Barbero M., Bellini V., Belyaev V., et al.* Development of Diamond Tracking Detectors for High Luminosity Experiments at the LHC // *CERN/LHCC 2008-005, LHCC-RD-016, Status Report/RD42, April 4, 2008*

УДК 538.915

Халькогениды висмута и сурьмы: особенности распределения зарядовой плотности, необычные магнитные свойства и сверхпроводимость

В.Г. Орлов^{1,2}, Г.С. Сергеев¹, Э.А. Кравченко³

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

³Институт общей и неорганической химии имени Курнакова РАН

С помощью комплекса программ WIEN2k выполнены расчеты электронной зонной структуры соединений Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Bi_2S_3 , $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$, Sb_2Te_3 , Sb_2Se_3 и Sb_2S_3 для давлений в интервале от 0 до 10 ГПа. С целью установления связи между кристаллической структурой, необычными физическими свойствами (включая магнитные и сверхпроводящие) и типом химической связи в халькогенидах висмута и сурьмы проведен анализ параметров критических точек в распределении зарядовой плотности вышеуказанных соединений (в критических точках градиент зарядовой

плотности равен нулю). Корреляции между температурой сверхпроводящего перехода T_c и значением лапласиана зарядовой плотности в критической точке типа “bond” с максимальной величиной заряда, выявленные ранее для кристаллов, находящихся при атмосферном давлении [1], были подтверждены в расчетах, сделанных для кристаллических структур при более высоких давлениях. Найденные параметры критических точек указывают на существенную роль флуктуаций зарядовой плотности в халькогенидах висмута и сурьмы, широко известных в качестве многофункциональных материалов.

Огибающие ЯКР спинового эха, относящиеся к переходу между нижними уровнями ($\Delta m=1/2-3/2$) ядерных спинов $^{121,123}\text{Sb}$, были измерены для двух кристаллографических позиций атомов сурьмы в структуре Sb_2S_3 . Необычайно сильные осцилляции на огибающих ЯКР спинового эха были обнаружены в очень маленьких внешних магнитных полях величиной 1-3 Э. Данные осцилляции свидетельствуют о наличии локальных магнитных полей в Sb_2S_3 , аналогичных тем, которые ранее были обнаружены в оксидных висмутовых соединениях [2].

Литература

1. Orlov V.G., Sergeev G.S. Peculiarities of electron density distribution in bismuth chalcogenides, iron pnictides, cuprates and related unconventional superconductors // *Physica B* 2018. V. 536. P. 839.
2. Kravchenko E.A., Orlov V.G., Shlikov M.P. Magnetic properties of bismuth(III) oxy compounds // *Russian Chemical Reviews* 2006. V. 75. P. 77.

УДК 535.015, 535.361.22

Изменение эффективности комбинационного рассеяния света в диметилсульфоксиде, вызванное упругим рассеянием света на частицах порошков рутила и фосфида галлия

О.И. Соколовская, Н.Б. Ткаченко

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Упругое рассеяние света – хорошо изученное явление, присущее неоднородным средам. Оно может привести к увеличению объема взаимодействия излучения с веществом - по сравнению с таковым в однородной среде. При наличии в среде рассеивающих неоднородностей возможно увеличение эффективности нелинейно-оптических процессов [1, 2]. Представляет интерес вопрос о том, какова степень влияния некогерентных эффектов на интенсивность сигнала, вышедшего из неоднородной среды.

Рассмотрено распространение лазерного излучения в суспензиях порошков рутила и фосфида галлия в диметилсульфоксиде (DMSO) с размерами частиц 0.5 мкм и 3 мкм соответственно. Проведено сравнение временных характеристик обратнорассеянного излучения от чистого растворителя и от суспензий с различными объемными долями рассеивателей. Проведено сравнение эффективности комбинационного рассеяния света (КРС) на молекулах DMSO чистого растворителя и на таковых в составе рассеивающих суспензий.

Методом оптического гетеродинамирования [3] при использовании импульсного излучения с длиной волны 1250 нм и длительностью импульса 80 фс были измерены кросс-корреляционные функции сигналов, отраженных от кювет с суспензиями. Из этих данных были получены зависимости мощности отраженного от кюветы сигнала от времени задержки импульса (рис. 1.а). По полученным данным было рассчитано время пребывания в суспензии обратнорассеянных фотонов. Данная величина убывала при повышении объемной доли рассеивателей Φ в диапазоне от 0.001 до 0.2, причем для рутила скорость убывания была выше. В суспензиях фосфида галлия было обнаружено поглощение на частицах порошка, влияние которого увеличивалось при повышении объемной доли рассеивателей. Данные результаты хорошо согласуются с результатами соответствующего моделирования. В рамках модели Монте-Карло [4] вероятность единичного акта рассеяния в суспензии рутила выше, чем в суспензии фосфида галлия, при одинаковой объемной доле рассеивателей. Таким образом, повышение объемной доли неоднородностей в суспензии приводит к росту мощности обратнорассеянного излучения. Эффективность такого обратного рассеяния выше для неоднородностей с диаметром, меньшим, чем длина волны распространяющегося излучения.

Методом Монте-Карло была рассчитана средняя длина траектории всех распространяющихся в суспензии фотонов, а также средняя длина траектории обратнорассеянных фотонов. Средняя длина траектории фотонов возрастала в суспензии рутила в 2.3 раза, в суспензии

фосфида галлия – в 1.5 раза. Данная зависимость согласовывалась с поведением рассчитанной зависимости числа актов КРС в DMSO присутствии различных объемных долей неоднородностей. Средняя длина траектории обратнорассеянных фотонов убывала до некоторого постоянного значения при повышении объемной доли рассеивателей.

Было проведено измерение спектров КРС суспензий и их сравнение со спектром КРС чистого DMSO (рис. 1.б.). Оказалось, что зависимость интенсивности сигнала КРС, зарегистрированного в геометрии «на отражение», от объемной доли неоднородностей является немонотонной. В суспензиях рутила для отдельных линий спектра КРС возможно усиление сигнала в 3-4 раза, и оно достигается на промежуточных значениях объемной доли рассеивателей (рис. 1.в). Для суспензий фосфида галлия КРС спектроскопия показала ослабление сигнала КРС по сравнению с чистым растворителем. При снятии спектров КРС от суспензий фосфида галлия была обнаружена широкая полоса дефектной люминесценции, что вновь указало на наличие поглощения входящего излучения. Результаты моделирования находятся в качественном согласии с экспериментальными данными: зависимость числа обратнорассеянных фотонов КРС от объемной доли неоднородностей в рамках модели Монте-Карло немонотонна и обладает одиночным максимумом, положение которого зависит от диаметра и показателя преломления рассеивателей. Поглощение на рассеивающих частицах также заметно ослабляет эффективность КРС в суспензии.

Таким образом, численное моделирование распространения света в суспензиях рутила в DMSO и результаты соответствующего эксперимента показали возможность увеличения интенсивности комбинационного рассеяния в присутствии упругого рассеяния в рассматриваемой среде - до 4 раз. Тем не менее, характер влияния упругого рассеяния на эффективность интересующего оптического процесса неоднозначен. Объемные доли рассеивателей порядка 0,001 и выше приводят к слабому проникновению фотона в глубину образца и их более быстрому отражению в обратном направлении - уменьшается объем взаимодействия излучения и вещества. Численное моделирование распространения света в суспензиях GaP в DMSO и результаты соответствующих экспериментов показали сильное снижение эффективности комбинационного рассеяния в присутствии рассеивателей за счет поглощения.

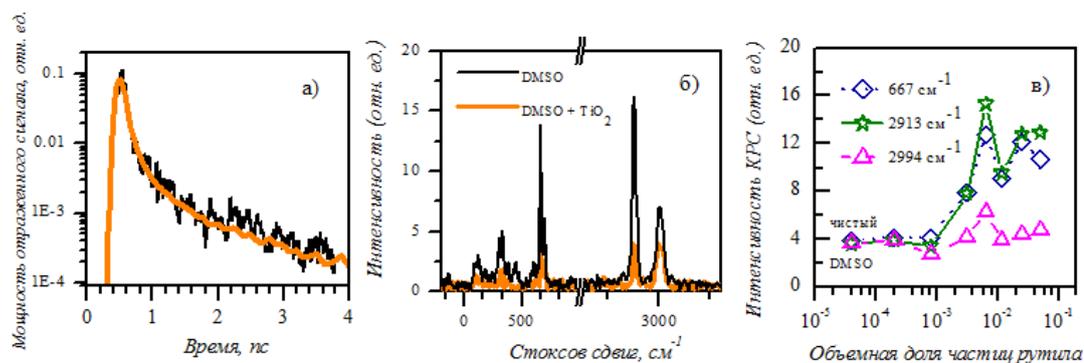


Рис.1. (а) Временная характеристика сигнала, отраженного суспензией фосфида галлия с объемной долей рассеивателей 0.121; (б) Сравнение спектра КРС чистого DMSO и DMSO в составе суспензии с рутилом; (в) Зависимость интенсивности линий КРС DMSO от объемной доли порошка рутила в суспензии.

Литература

1. V.A. Mel'nikov, L.A. Golovan, S.O. Konorov [et al.] Second-harmonic generation in strongly scattering porous gallium phosphide // *Appl. Phys. B*. 2004. V. 79, N 2, P.225-228.
2. Л.А. Головань, А.А. Соколов, В.Ю. Тимошенко [и др.] Рост времени жизни фотона и увеличение эффективности процессов комбинационного рассеяния света и генерации второй гармоники в пористом карбиде кремния // *Письма в ЖЭТФ*. 2015. Т. 101, № 12 С. 891-896
3. К.П. Бестемьянов [и др.] Динамика распространения фемтосекундных ИК лазерных импульсов в сильно рассеивающей пористой среде, исследуемая по схеме оптического гетеродинамирования // *Квантовая электроника*. 2004. Т. 34, № 7. С. 666-668.
4. В.Н. Нокр, В.В. Яковлев. Raman signal enhancement via elastic light scattering // *Optics express*. 2013. V. 21, N 10. P. 11757.

УДК 538.945

Применение ВТСП проводов для сверхпроводниковой системы магнитной холодильной машины

*М.К. Алексашин¹, Е.П. Красноперов^{1,2}, В.В. Гурьев², В.С. Коротков², В.Е. Крылов²,
В.В. Сычугов², С.В. Шавкин²*

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

По сравнению с традиционными методами охлаждения, которые используются в холодильных машинах парокомпрессионного типа, магнитный принцип охлаждения имеет повышенную энергоэффективность и улучшенные эксплуатационные характеристики (высокую износостойкость, безопасность) и характеризуется отсутствием вредных газов, таких как аммиак. Работа магнитной холодильной машины (МХМ) основана на магнитокалорическом эффекте. Холодопроизводительность МХМ практически линейно увеличивается с величиной индукции магнитного поля, необходимого для намагничивания рабочего тела. Это определяет интерес к сверхпроводящим магнитным системам (СМС), особенно для применения в крупных (промышленных) установках, мощностью 1-10 кВт и выше. В настоящее время проводятся работы по созданию компактной МХМ, в которой сильное магнитное поле создается сверхпроводниковой магнитной системой на основе ВТСП проводов, изготовленных в НИЦ «Курчатовский институт».

Архитектура слоев ВТСП провода показана на рис. 1а. Основной сверхпроводящий слой (толщина 1-2 мкм, выполнен на основе керамики $YBa_2Cu_3O_{7-x}$) в данной технологии напыляется на установке импульсного лазерного осаждения. На рис. 1б показано изображение поперечного среза ВТСП провода, полученного в растровом электронном микроскопе.

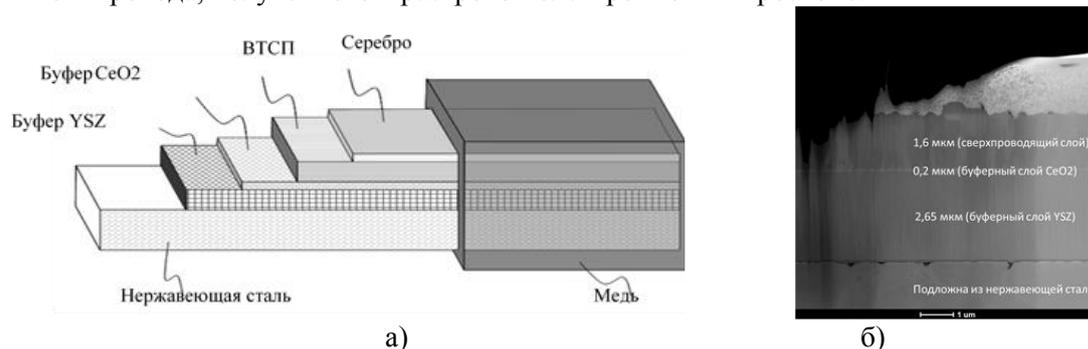


Рис. 1. Архитектура слоев ВТСП проводов, изготовленных в НИЦ «Курчатовский институт» (а) и РЭМ изображение поперечного среза ВТСП провода (б)

Величина транспортного критического тока ВТСП ленты во внешнем поле определялась при температурах 4,2, 65 и 77К четырехконтактным методом из вольт-амперной характеристики при появлении электрического поля на уровне $E=0,1$ мкВ/см. При температуре кипения жидкого азота (77 К) в собственном магнитном поле критический ток в образцах составлял $I_c \sim 110$ А. В сильном магнитном поле критический ток заметно снижается и имеет ярко выраженную анизотропию по отношению к направлению внешнего магнитного поля. Анизотропию токонесущей способности по отношению к направлению магнитного необходимо учитывать при проектировании соленоида, поскольку крайние (наружные) галеты соленоида находятся в наклонном магнитном поле. При снижении температуры до 4,2 К критический ток ВТСП ленты заметно возрастает, в том числе в самом неблагоприятном для ВТСП провода направлении, с точки зрения учета анизотропии токонесущей способности, т.е. когда поле перпендикулярно плоскости ленты (см. рис. 2а). Видно, что при гелиевых температурах даже при самой неблагоприятной ориентации магнитного поля критический ток ВТСП ленты в поле 3 Тл превышает 480 А, а в поле 10Т составляет 300 А. Этого достаточно для создания сверхпроводниковых магнитов с полями вплоть до 7-8 Тл и выше. Для промежуточных температур (от 4,2 К до 77 К) в диапазоне полей до 7 Тл оценка величины критического тока ВТСП ленты проводилась бесконтактным методом, по полевой зависимости магнитного момента $M(H)$, измеренного на вибрационном магнитометре LakeShore и СКВИД-магнитометре Quantum Design (см. рис.2б).

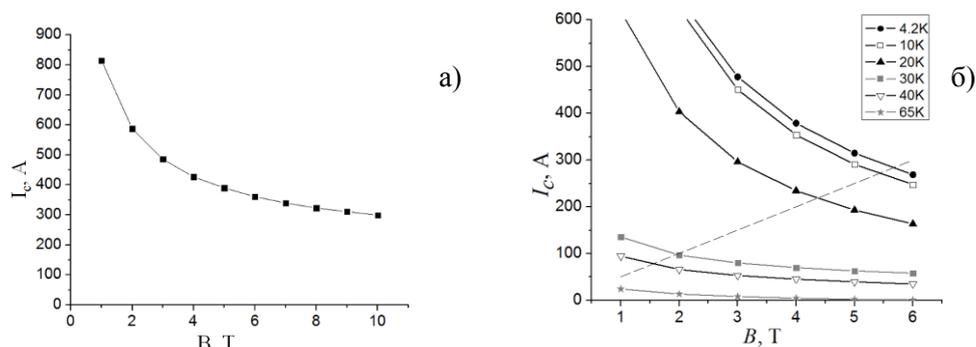


Рис. 2. Полевая зависимость критического тока ВТСП провода в перпендикулярном магнитном поле. Транспортные измерения при 4,2 К (а) и бесконтактные измерения при различных температурах (б)

Критический ток превышает 300 А при температурах ниже 20К в области ~ 3 Т при этой ориентации магнитного поля. Таким образом, учитывая свойства ВТСП проводов, рабочая температура обмотки электромагнита должна находиться в диапазоне от 20К до 30К. При этих условиях оценка величины тока в 200 А может считаться безопасной для магнита с полем ~ 3 Т.

Сверхпроводящая магнитная система (СМС) разрабатывается в соответствии с требованиями магнитной холодильной машины. Магнитное поле в центральной части соленоида составляет ~ 3 Т. Диаметр «теплого» отверстия магнита составляет 60 мм. Высота соленоида 120 мм. Длины единичного куска ВТСП провода ~ 75 м. Для соленоида выбрана структура двойных плоских галет. Главным преимуществом этой структуры является ремонтпригодность: в случае аварии (квенча) поврежденные галеты могут быть заменены. Кроме того, структура позволяет использовать куски провода с различным критическим током. Соленоид состоит из 12 плоских двойных галет из ВТСП проводов шириной 4 мм и толщиной $\sim 0,15$ мм, изготовленных и испытанных в НИЦ «Курчатовский институт». Расчетная картина распределения магнитного поля во внешней двойной галете соленоида показывает, что максимальное поле $\sim 2,5$ Т на краю соленоида направлено под углом $\sim 55-60$ град. к плоскости ленты, т.е. не достигает «наихудшего» перпендикулярного направления, тем не менее рабочая температура была выбрана, исходя из характеристической функции соленоида $B(I)$, отмеченной штриховой линией на рис. 2б. Для поля ~ 3 Т и температуры $\sim 20-25$ К I_c существенно выше, чем рабочий ток в 150 А.

Охлаждение СМС к низкой температуре выполнено с использованием криокулера RKD-408D2. Эта модель обеспечивает хладопроизводительность на уровне 35-45 Вт на первой ступени (~ 45 К) и 15 Вт во второй ступени (~ 20 К), соответственно. Элементы СМС разработаны таким способом, что тепловые потоки к соответствующим ступеням не превышают хладопроизводительность криокулера. Выполненные оценки тепловых потоков показывают, что охлаждающая способность криокулера достаточна, чтобы обеспечить устойчивую работу соленоида при этой температуре. Схема магнита и криостата показаны на рис.3.

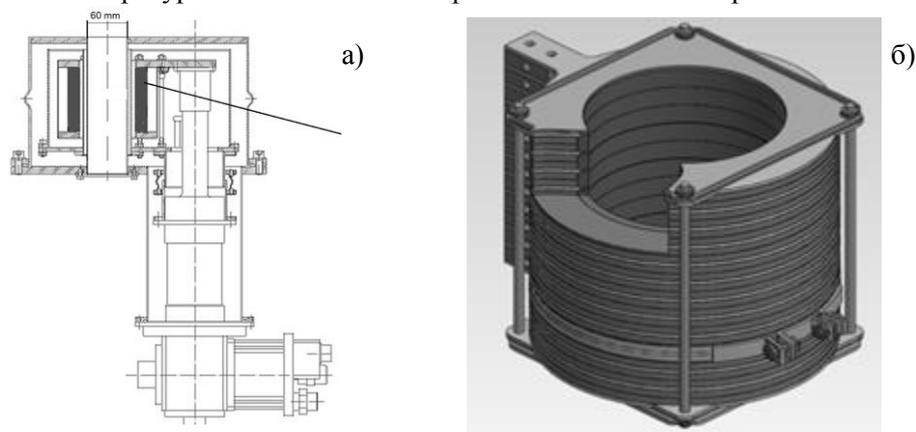


Рис.3. Сверхпроводниковая магнитная система с криокулером (а) и конструкция соленоида из плоских галетных обмоток (б)

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках соглашения №14.604.21.0197 о предоставлении субсидии (уникальный идентификатор прикладных научных исследований RFMEFI60417X0197).

УДК 536.2.081.7

Теплопроводность тонкопленочных структур $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{AlGaN}$

Д.А. Чернодубов, А.В. Инюшкин

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В последнее время всё большее значение в высокочастотной и высокоомощной электронике приобретают полевые транзисторы с высокой подвижностью электронов, изготовленные на основе гетеропереходов AlGaN/GaN [1]. За счёт уникальных свойств нитрида галлия, в том числе, большой ширины запрещённой зоны и высокой подвижности носителей заряда, достигаемая в этих устройствах плотность мощности превышает 30 Вт/мм [2]. При этом количество джоулева тепла, выделяемое при таких мощностях, весьма велико, и в случае плохого теплоотвода может привести к росту температуры и последующему перегреву транзистора, что приведет к ухудшению его работоспособности и возможности поломки [3].

На теплоотвод в таком транзисторе влияет как теплопроводность самого GaN , так и теплопроводность подложки и буферных слоев. Соответственно, представляет интерес измерение теплопроводности сапфира (Al_2O_3) и слоев AlGaN , на которых происходит рост нитрида галлия. Известно, что при относительно высокой теплопроводности как AlN , так и GaN (порядка $2 \text{ Вт}\cdot\text{см}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$ [4] и $1,3 \text{ Вт}\cdot\text{см}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$ [5] соответственно для объемных кристаллов при комнатной температуре), теплопроводность AlGaN меньше этих величин на порядок [6].

В работе измерена теплопроводность многослойной структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{AlGaN}$. Исследуемые образцы наносились на сапфировую подложку толщиной 0,4 мм методом молекулярно-лучевой эпитаксии в следующем порядке:

1. Слой AlN толщиной 10 нм, нанесенный при низкой температуре,
2. Слой AlN толщиной 150 нм, нанесенный при высокой температуре,
3. Слой $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ толщиной 220 нм, с градиентом x от 0 до 0,4,
4. Слой $\text{Al}_{0,6}\text{Ga}_{0,4}\text{N}$ толщиной 140 нм,
5. Слой $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ толщиной 60 нм, с градиентом x от 0,4 до 0,95.

Измерение проведено методом 3-омега с помощью нанесения золотых нагревателей толщиной 200 нм, длиной 2 мм и ширинами от 5 до 40 мкм методом фотолитографии. Результаты измерений согласуются с опубликованными данными других авторов.

Литература

1. *M. Kuzuhara, H. Miyamoto, Y. Ando, T. Inoue, Y. Okamoto, and T. Nakayama*, High-voltage rf operation of AlGaN/GaN heterojunction FETs // *Phys. Status Solidi A* 2003. 200, 161.
2. *Y.-F. Wu, A. Saxler, M. Moore, R. P. Smith, S. Sheppard, P. M. Chavarkar, T. Wisleder, U. K. Mishra, and P. Parikh*, 30-W/mm GaN HEMTs by field plate optimization// *IEEE Electron Device Lett.* 2004. 25, 117.
3. *P. Lall, M. Pecht, E. Hakim*, Influence of temperature on Microelectronics and System reliability. CRC Press, New York, 1997.
4. *G. A. Slack*, Nonmetallic crystals with high thermal conductivity // *J. Phys. Chem. Solids*, 1973. 34, 321.
5. *E. K. Sichel and J. I. Pankove*, Thermal conductivity of GaN , 25-360K // *J. Phys. Chem. Solids*, 1977. 38, 330.
6. *B. C. Daly, H. J. Maris, A. V. Numikko, M. Kuball, and J. Han*, Optical pump-and-probe measurement of the thermal conductivity of nitride thin films // *J. Appl. Phys.* 2002. 92, 3820.

УДК 538.91

Распад сплава Al-Cu и формирование зон Гинье-Престона на основе кинетической теории с первопринципной параметризацией.

А.Ю. Строев

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Проведено исследование кинетики распада твёрдого раствора и образования микроструктур в системе Al-Cu на основе статистической кинетической теории [1], параметризованной первопринципными межатомными взаимодействиями, включающими как химические, так и деформационные вклады [2]. Показано, что распад твёрдого раствора Al-Cu происходит с образованием тонких пластин Cu, ориентированных в плоскостях {001}, которые известны как зоны Гинье-Престона (GP) [3], и включает несколько этапов. А переход от зон типа GP1 к зонам типа GP2 определяется в основном кинетическими факторами. Предложенная модель предсказывает также постепенный переход от плоских выделений к равноосным с повышением температуры, а в области промежуточных температур обе морфологические формы могут сосуществовать.

Литература

1. *Khromov K.Yu., Soisson F., Stroeve A.Yu., and Vaks V.G.* Stochastic statistical theory of nucleation and evolution of nano-sized precipitates in alloys with an application to precipitation of copper in iron // JETP. 2011. V. 139. P. 479.
2. *Gorbatov O. I., Gornostyrev Yu. N., and Korzhavyi P. A.* Many-body mechanism of Guinier-Preston zones stabilization in Al-Cu alloys // Scr. Mater. 2017. V. 138. P. 130.
3. *Guinier A.* Heterogeneities in Solid Solutions // Solid State Phys. 1959. V. 9. P. 293.

УДК 533.9.01

Автомодельное решение задачи супердиффузионного переноса для конечной скорости переносчиков

А.А. Куличенко¹, А.Б. Кукушкин^{1,2}

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Ряд физических явлений переноса носит нелокальный (супердиффузионный) характер. К таким явлениям относится перенос энергии фотонами в спектральных линиях атомов и ионов в плазме, описываемый уравнением Бибермана-Холстейна (Б-Х) (см. напр. [1]). Нелокальный перенос описывается интегральным уравнением для плотности возмущений, которое не сводится к дифференциальному уравнению диффузии. Здесь рассмотрен одномерный перенос возмущения среды длиннопробежными переносчиками (т.н. полёты Леви, Lévy flights) конечной скорости (такие блуждания называют Lévy walks, [2]). Уравнение для функции Грина $f(x, t)$ одномерного аналога уравнения типа Б-Х в однородной среде с учетом конечности скорости движения R_c переносчиков имеет вид [3]:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -\left(\frac{1}{\tau} + \sigma\right) f(x, t) + \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' W(|x-x'|) f(x', t - \frac{|x-x'|}{R_c}) \theta(t - \frac{|x-x'|}{R_c}) + \delta(x) \delta(t), \quad (2)$$

где τ — среднее собственное время жизни локального возбуждения среды, σ — вклад девозбуждения («тушения»); $W(\rho) = 0.5 \gamma / (1 + \rho)^{\gamma+1}$ — вероятность поглощения переносчика после прохождения им расстояния ρ (функция распределения по длине свободного пробега переносчиков), $\int_{-\infty}^{+\infty} W(|x-x'|) dx' = 1$, $0 < \gamma < 2$; $\theta(y)$ — ступенчатая функция Хевисайда; $\delta(y)$ — дельта-функция Дирака.

Общее решение уравнения (1) в безразмерной форме (t измеряется в единицах τ , x — в характерных длинах свободного пробега) имеет вид [3]:

$$f(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^2 i} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx} \lim_{\alpha \rightarrow +0} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \frac{e^{st} ds}{s + 1 + \sigma\tau - \gamma \int_0^{+\infty} e^{-su/R_c} \cos(pu) / (1+u)^{\gamma+1} du}. \quad (3)$$

Параметр $R_c = c\tau\kappa_0$ есть отношение среднего времени жизни возмущения (для переноса фотонов — радиационного времени жизни возбужденного атома или иона в плазме) к пролетному времени

(для переносчиков конечной скорости). Рассмотрен случай $\gamma = 0.5$, что для переноса фотонов соответствует лоренцевскому контуру спектральной линии атомов и ионов в плазме.

Численное моделирование процессов нестационарного нелокального переноса является трудоемкой задачей решения интегро-дифференциальных уравнений. Для существенного сокращения объема расчетов нами предложены приближенные автомодельные решения для «прогулок Леви» в обобщение метода [4] для «полетов Леви». Данные решения основаны на законах подобия для асимптотик функции Грина далеко перед фронтом распространения возмущения [3]:

$$f(x \rightarrow \infty, t - |x|/R_c \rightarrow 0) = (t - |x|/R_c)W(|x|)\theta(t - |x|/R_c), \quad (4)$$

и далеко позади него (асимптотика справедлива при больших временах: $t \gg R_c \rightarrow \infty$):

$$f(x \rightarrow 0, t \rightarrow \infty) = 1/(R_c^{1/2}t^{3/2})2/\pi^2 \left[\pi/8 + 1/2 \operatorname{arccth} \left(2\sqrt{2 + \sqrt{3}} \right) \right] = 0.0930/(R_c^{1/2}t^{3/2}) \quad (5)$$

Формула (4) конкретизирует численный коэффициент в скейлинге, найденном в [5].

Численный расчет общего решения (2) и его сравнение с асимптотиками (3)-(5) для момента времени $t = 100$, $R_c = 1$, показаны на рис. 1. Расчет для случая больших скоростей, $R_c = 100$, для того же момента времени в сравнении с приближенным автомодельным решением для бесконечной скорости (см. (9) в [4]) представлен на рис. 2.

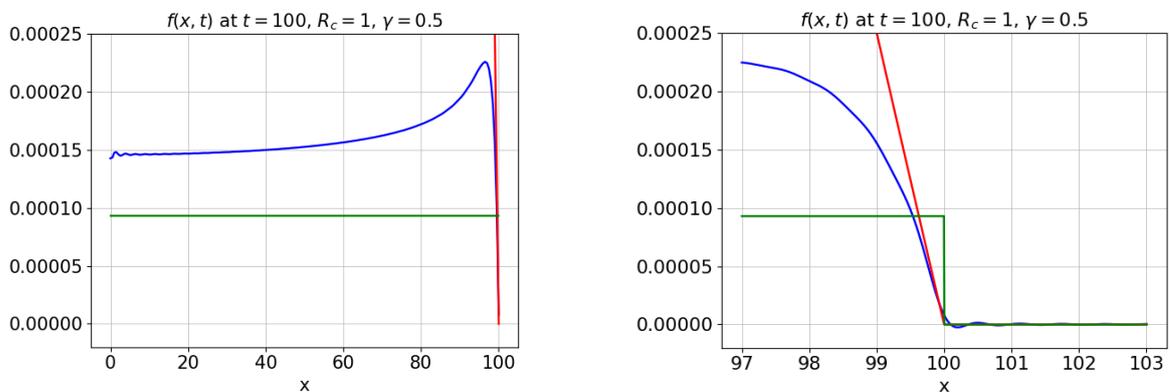


Рис. 1. Результаты численного расчета точного решения (1) (синяя кривая), асимптотики далеко впереди фронта (3) (красная кривая) и далеко позади фронта (4) (зеленая кривая) для момента времени $t=100$ и параметра $R_c=1$.

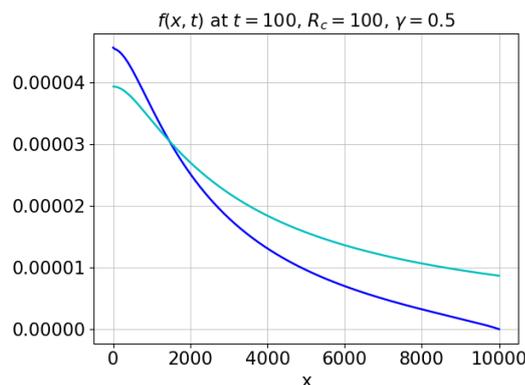


Рис. 2. Сравнение результата численного расчета точного решения (1) для момента времени $t=100$ и параметра $R_c=100$ (синяя кривая) с приближенным автомодельным решением задачи без учета конечной скорости переносчиков (фотонов) при $t=100$, см. (9) в [4] (голубая кривая).

Полученное общее решение для функции Грина и ее асимптотики открывают возможность построения приближенного автомодельного решения, обобщающего подход [4] на случай конечной скорости переносчиков.

Работа частично поддержана грантом РФФИ №18-07-01269-а.

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (субсидия Минобрнауки, идентификатор работ RFMEFI62117X0016), <http://ckp.nrcki.ru/>.

Литература

1. *Абрамов В.А., Коган В.И., Лисица В.С.* Вопросы теории плазмы / под ред. М.А. Леонтовича и Б.Б. Кадомцева, Вып. 12, с. 114-155, 1982.
2. *Zaburdaev V., Denisov S., Klafter J.* Lévy walks // *Rev. Mod. Phys.*, 2015, 87, p. 483.
3. *A A Kulichenko, A B Kukushkin* Scaling Laws of Biberman-Holstein Equation Green's Function and Implications for Superdiffusion Transport Algorithms // *IRAMP*, 2017, vol. 8(1), pp. 5-14.
4. *Kukushkin A.B., Sdvizhenskii P.A.* Automodel solutions for Lévy flight-based transport on a uniform background // *J. Phys. A: Math. Theor.*, 2016, 49, 255002.
5. *В.Ю. Забурдаев, К.В. Чукбар* Ускоренная супердиффузия и конечная скорость полетов Леви // *ЖЭТФ*, т. 121, вып. 2, 2002.

Научное издание

Труды

61-й Всероссийской научной конференции МФТИ

19–25 ноября 2018 года

Нано-, био-, информационные, когнитивные и социогуманитарные
науки и технологии

Составители:

М.В. Милов, В.Г. Орлов

Редакторы:

В.А. Дружинина, И.А. Волкова

Набор и вёрстка:

Н.А. Сидорец

Подписано в печать 03.12.2018. Формат 60×84 ¹/₈.

Усл. печ. л. 8,75. Тираж 50 экз. Заказ № 285.

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт
(государственный университет)»

141707, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9
Тел. (495)408-58-22

Полиграфия "ПРОДВИЖЕНИЕ"
123592, г. Москва, ул. Кулакова дом 20, стр. 1Б
E-mail: info@prodv.pro
Тел. (495) 988-93-68

Объявление о проведении конкурса молодых учителей физики «Профессиональное мастерство учителя физики» (далее – конкурс)

Конкурс организуется и проводится Фондом развития Физтех-школ (далее – Фонд) с использованием гранта Президента Российской Федерации на развитие гражданского общества, предоставленного Фондом президентских грантов, на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» (далее – МФТИ).

Принять участие в конкурсе могут педагогические работники (до 40 лет) организаций, осуществляющих образовательную деятельность, участвующие в реализации общеобразовательных программ в области физики, в том числе работающие по совместительству.

Этапы конкурса (информация представлена на сайте: учителя-мастерство.рф):

первый этап заочно в режиме онлайн в форме представления до 10 января 2019 г. своего «портфолио» и/или своих методик и разработок по обучению школьников решению экспериментальных задач по физике;

второй этап очно в форме семинара с 30 июня по 13 июля 2019 г. на базе МФТИ (141701 Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер. 9).

По итогам первого этапа конкурса не менее 100 участников будут приглашены для очного участия во второй этап конкурса с возмещением Фондом расходов за проживание, из них не менее 50 участников – также с возмещением Фондом расходов за проезд.

Во втором этапе конкурса может участвовать не более 2 участников от одного субъекта Российской Федерации.

Контактная информация: телефон +7 915-217-21-00, адрес электронной почты master-teacher2018@mail.ru.