



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА



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

**ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА,  
ТЕХНОЛОГИИ, ПРИМЕНЕНИЕ  
И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЙ  
С ВЕЩЕСТВОМ**

*Отчет за 2022 год*

*Москва  
2023*

**УДК 539.165:537,591**  
**БИК 22.38**

**ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА, ТЕХНОЛОГИИ,  
ПРИМЕНЕНИЕ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЙ  
С ВЕЩЕСТВОМ.**

Отчет за 2022 год

Под редакцией член-корр. РАН Э.Э. Бооса, Е.А. Сигаевой

ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА, ТЕХНОЛОГИИ, ПРИМЕНЕНИЕ И  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЙ С ВЕЩЕСТВОМ.

Отчет за 2022 год /Под редакцией член-корр.РАН Э.Э. Бооса,  
Е.А. Сигаевой; Московский государственный университет имени  
М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт ядерной физики  
имени Д.В. Скобельцына. — М., 2023.

В сборнике содержится краткое описание полученных в НИИЯФ МГУ в 2022 г. результатов исследований в области изучения наноструктур: физика, технологии, применение и взаимодействия излучений с веществом, составленное отделом научной информации на основе данных, предоставляемых информационно-аналитической системой «Наука — МГУ» и опубликованных в отечественной и зарубежной литературе.

**К 270-ЛЕТИЮ СО ДНЯ ОСНОВАНИЯ  
МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА**

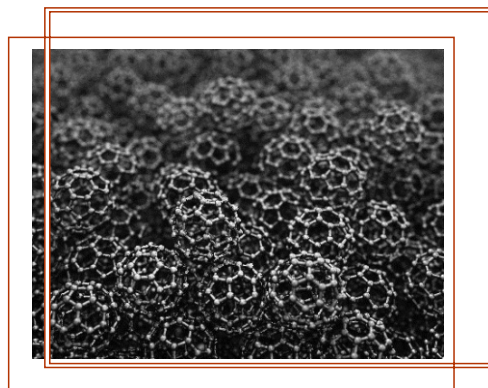


## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА, ТЕХНОЛОГИИ, ПРИМЕНЕНИЕ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЙ С ВЕЩЕСТВОМ. КРАТКАЯ СПРАВКА .....</b>	<b>5</b>
<b>ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ В НИИЯФ МГУ В 2022 г. В ОБЛАСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЙ С ВЕЩЕСТВОМ .....</b>	<b>7</b>
Исследование наноструктур: физика, технологии, применение .....	7
Взаимодействие излучений с веществом .....	19
<b>СОБЫТИЯ 2022 года .....</b>	<b>25</b>
Навигационная система «Мультитрек» .....	25
Кандидатские диссертации .....	26

## **ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА, ТЕХНОЛОГИИ, ПРИМЕНЕНИЕ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЙ С ВЕЩЕСТВОМ. КРАТКАЯ СПРАВКА**

В НИИЯФ МГУ ведутся работы по экспериментальному и теоретическому исследованию процессов в наноструктурах и устройствах на их основе. Исследования проводятся как на базе комплекса современного технологического, диагностического и измерительного оборудования НИИЯФ МГУ, так и других научных центров. Исследования наноструктур важны для решения фундаментальных научных проблем и для перспективного создания на основе открытых явлений совершенно новых квантовых устройств и систем с широкими функциональными возможностями, например, для опто- и наноэлектроники, измерительной техники, информационных технологий нового поколения, средств связи.



Взаимодействие пучков заряженных частиц с твердым телом является одним из самостоятельных разделов фундаментальной физики. Он включает в себя значительное количество разнообразных процессов и явлений, некоторые из которых приводят к изменению физических свойств твердых тел и, следовательно, связаны с проблемой создания материалов с заданными свойствами. В рамках этого направления сотрудниками НИИЯФ МГУ получены важные результаты: исследованы эффекты высокодозного радиационного воздействия на углерод-углеродные композиционные материалы, а также эффекты транспортировки потока ионов через конические капилляры для точечной модификации материала, например, в живой биологической клетке с целью проведения «хирургии клетки».

*Тематический план научно-исследовательских работ НИИЯФ МГУ в 2022 г. включил в себя 6 тем исследований наноструктур и взаимодействия излучений (синхротронного, лазерного, радиочастотного) и ускоренных ионов с веществом:*

- «Исследование процессов в наноструктурах и устройствах на их основе»;
- «Формирование наноструктурных объектов и их исследования спектроскопическими методами»;
- «Экспериментальные и теоретические исследования неравновесных плазменных процессов в газовой фазе и на поверхности»;
- «Ядерно-физические методы и физические свойства наноструктур»;
- «Нейтроннография поверхностей и слоистых структур»;
- «Экспериментальные и теоретические исследования взаимодействий синхротронного, лазерного, ионизирующего и радиочастотного излучений с веществом».

НИИЯФ МГУ совместно с физическим факультетом МГУ активно участвует в деятельности междисциплинарной Научно-образовательной школы МГУ «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина» и реализует ее следующие проекты:

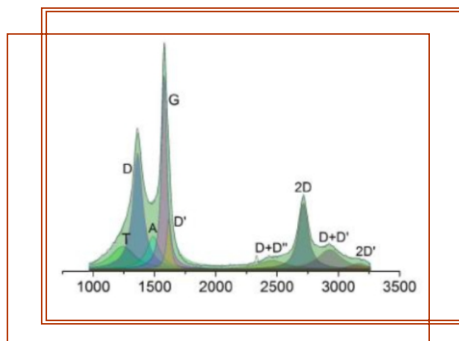
- *«Плазменные технологии в микроэлектронике»* с целью теоретического и экспериментального исследования ключевых физических процессов, определяющих характер плазменного структурирования поверхности материалов, которые по своим свойствам должны определить будущее микроэлектроники;
- *«Технологии обработки медицинских изображений»*, направленный на разработку автоматизированных компьютерных систем, предназначенных для диагностики, планирования и контроля лечения пациентов на основе информации, получаемой при обработке и анализе 2D/3D/4D медицинских изображений, функциональных и лабораторных исследований;
- *«Взаимодействие неклассических электромагнитных полей с наноструктурными системами»*, направленный на исследование фундаментальных основ взаимодействия неклассических (квантовых) электромагнитных полей с наноструктурными системами, свойства которых определяются макроскопическими квантовыми эффектами и размерным квантованием.

# ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ В НИИЯФ МГУ В 2022 г. В ОБЛАСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЙ С ВЕЩЕСТВОМ

## Исследование наноструктур: физика, технологии, применение

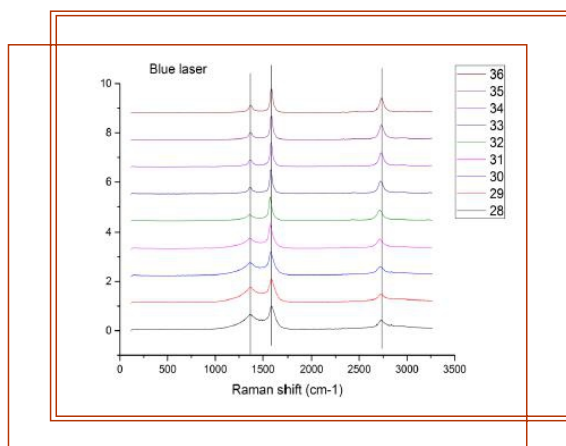
*Особенности спектров комбинационного рассеяния света в массивах вертикально ориентированных многостенных углеродных нанотрубок*

Исследовались особенности комбинационного рассеяния света в массивах вертикально ориентированных многостенных углеродных нанотрубок. Обнаружено неоднородное распределение упорядоченности структуры таких массивов вдоль направления их роста и увеличение концентрации дефектов при отдалении от подложки.



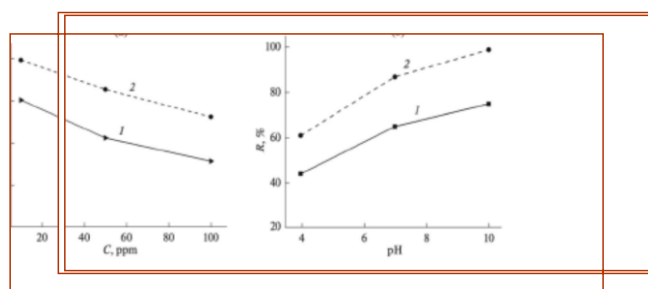
*Влияние мощности лазерного излучения на спектры комбинационного рассеяния многостенных углеродных нанотрубок*

Спектрометрия комбинационного рассеяния света является одной из наиболее широко используемых методик анализа ориентированных многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), при этом анализирующий лазерный пучок также является источником локального нагрева. При увеличении мощности лазерного излучения, а затем уменьшения до первоначальных значений отслеживалось поведение характерных пиков в спектре МУНТ: D, G, 2D(G'), а также D'. Был введен дополнительный пик для компенсации разницы между экспериментальным спектром и суммой компонент разложения (в области 1500 см<sup>-1</sup>), характер изменения которого отличается от поведения известных пиков, что говорит о различной природе их происхождения. Отмечено, что увеличение мощности лазера приводит к уменьшению количества дефектов в углеродных нанотрубках.



### Улучшение функциональных свойств поверхности углеродных нанотрубок за счет создания радиационно-индуцированных дефектов

Текущие исследования показывают, что облучение ионным пучком может улучшить функциональность поверхности углеродных нанотрубок за счет создания участков беспорядка. Ионы He с энергией 100 кэВ и флюенсом  $1 \cdot 10^{16} \text{см}^{-2}$  облучали фильтры из прессованных многослойных углеродных нанотрубок. Удаление Ni(II) из водных растворов с использованием первичных и облученных ионами многослойных углеродных нанотрубчатых фильтров исследовали в зависимости от pH, исходной концентрации Ni(II), веса фильтра и времени контакта. При концентрации Ni(II) 10 частей на миллион облученные фильтры продемонстрировали увеличение эффективности удаления Ni(II) на 99%, что означает, что облученный ионами фильтр лучше адсорбирует Ni(II) из водных растворов, чем чистый. Облучаемые фильтры обладают высокой гидрофильностью, высокой пропускной способностью и высокой поглощающей способностью.

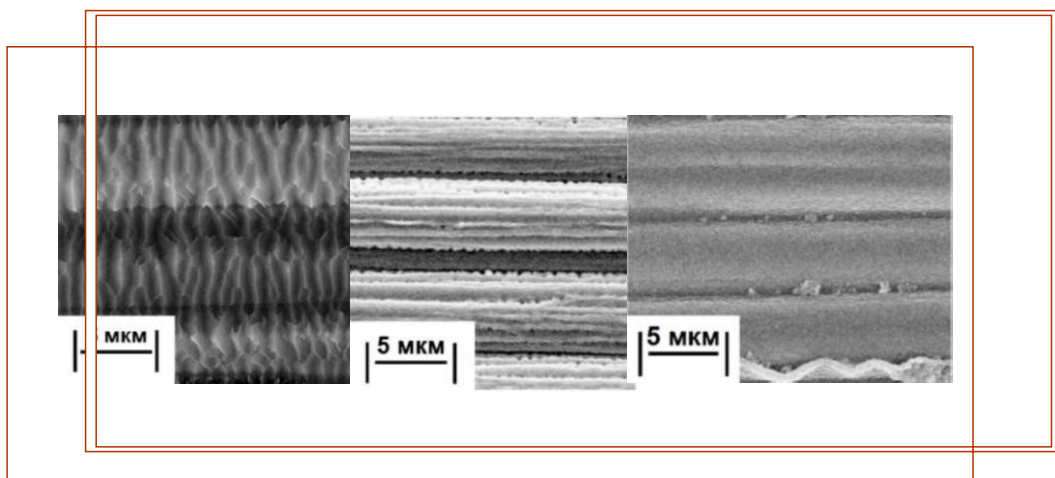


Изменение эффективности удаления Ni(II) фильтрами из не облученных(1), облученных(2) МУНТ в зависимости от: а – исходной концентрации в водном растворе; б – pH раствора Ni(II)

### Ионно-лучевое модифицирование углерод-углеродных композиционных материалов при высоких уровнях радиационных смещений в ядерных энергетических установках

Экспериментально исследована модификация структуры поверхности углеродных волокон на основе полиакрилонитрила (ПАН) при облучении ионами  $\text{C}^+$ ,  $\text{N}^+$ ,  $\text{N}^{2+}$ , и  $\text{Ar}^+$  с энергией 30 кэВ. Установлено, что эффект гофрирования поверхности волокна, характерный для высокофлюенсного облучения инертными газами и ионами азота, не проявляется при облучении ионами углерода. Рассмотрены зависимости формирования поверхностных структур от распределения по глубине  $\nu(x)$  числа смещений, приходящихся на один атом. Показано, что при гофрировании  $\nu$  монотонно убывает с максимумом на поверхности. Причиной гофрирования является двойникование кристаллитов волокнистой оболочки, которое вызвано зависящими от глубины радиационно-индуцированными изменениями размеров и релаксацией возникающих механических напряжений. Причиной отсутствия гофрирования поверхности при облучении  $\text{C}^+$  может быть образование бестекстурного модифицированного слоя.

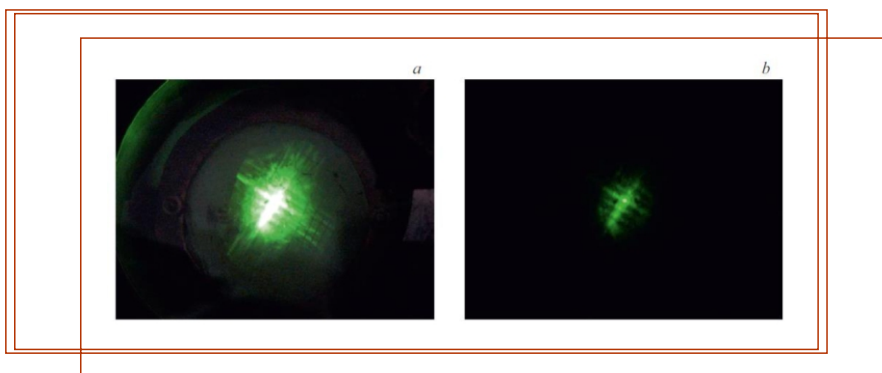




Изображения высокомодульного углеродного волокна на основе ПАВ при облучении ионами  $Ar^+$  при температуре  $T = 300^\circ C$ , ионами  $He^+$  при  $T = 400^\circ C$  и ионами  $C^+$  при  $T = 250^\circ C$  (слева направо), полученные сканирующим электронным микроскопом

*Пульсирующее рентгеновское излучение и пульсирующий электронный поток в устройствах на основе кристаллов ниобата бария-стронция  $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$*

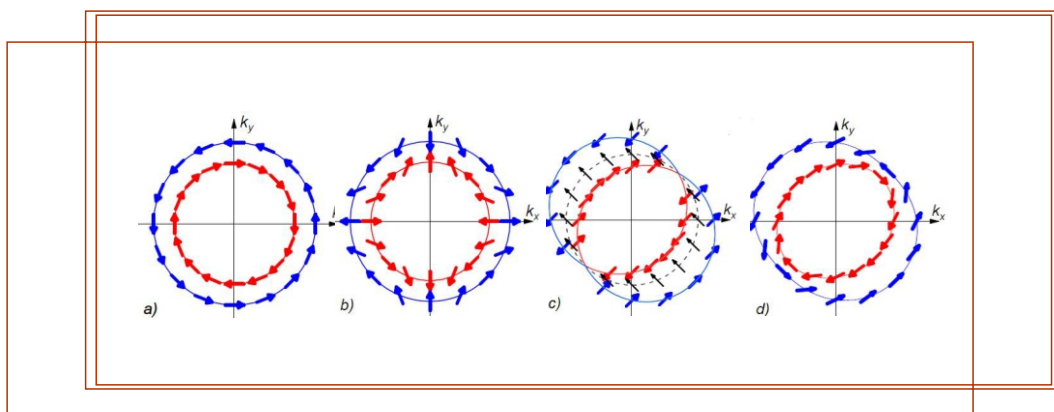
В рентгеновском генераторе на основе сегнетоэлектрического кристалла ниобата бария-стронция  $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$  (SBN-61) при температуре около  $50^\circ C$  обнаружены пульсации электронного потока и рентгеновского излучения при увеличении давления газа в интервале  $2 \cdot 10^{-2} - 10^{-1}$  Торр. Электронный поток имел в плоскости кристалла форму креста. Длительность вспышки не превышала 0,04 с. Период пульсации изменялся от 0,2 с в начале и до 5-10 с в конце при давлении  $\sim 0,1$  Торр. Наблюдаемый эффект объясняется движением доменных границ на деполяризованной грани кристалла в условиях вакуума, в результате чего возникает большой поверхностный заряд и, соответственно, электрический потенциал, приводящий к формированию импульсивного электронного потока.



Фотографии вспышек электронного потока при различных экспозициях:  $a - \tau = 15$  с;  $b - \tau = 2$  с

*Сверхпроводящий клапан, использующий взаимосвязь между спин-орбитальным и обменным взаимодействиями*

Был теоретически исследован эффект близости в структурах SNSOF и SF'S, состоящий из тонких пленок сверхпроводника (S), нормального металла (NSO) и ферромагнетика (F', F) со спин-орбитальным взаимодействием (SOI) в слое NSO. Показано, что нормальный слой со спин-орбитальным взаимодействием эффективно подавляет триплетные корреляции, генерируемые в ферромагнитном слое. Благодаря этому эффекту критическая температура сверхпроводящего слоя в мультислой SNSOF оказывается выше, чем в аналогичном мультислой без спин-орбитального взаимодействия в N-слое. Более того, при наличии смешанного типа спин-орбитального взаимодействия с участием компонент Рашбы и Дрессельхауса структура SNSOF представляет собой спиновой клапан, критическая температура которого определяется направлением вектора намагниченности в F-слое. Были рассчитаны управляющие характеристики спинового клапана SNSOF и выполнено их сравнение с имеющимися в традиционных устройствах SF'F с двумя ферромагнитными слоями. Сделан вывод, что структуры SNSOF с одним контролируемым слоем F обеспечивают солидные преимущества по сравнению с широко рассматриваемыми спиновыми клапанами SF'F, прокладывая путь для высокопроизводительных компонентов хранения для сверхпроводящей электроники.



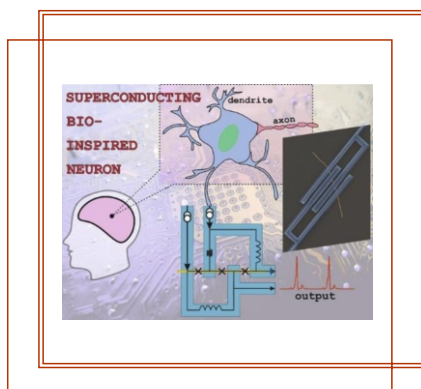
Спин-орбитальное взаимодействие Рашба  $H_R = -\frac{\alpha}{m} (\underline{\sigma} \times \underline{k}) \cdot \hat{z}$  (a), Дрессельхауса

$H_D = \frac{\beta}{m} (\sigma_y k_y - \sigma_x k_x)$  (b), смешанные взаимодействия с  $\alpha = \beta$  (c) и  $\alpha = 2\beta$  (d)

*Биоподобный сверхпроводниковый нейрон на основе золотых нанопроводов*

Учеными института совместно с коллегами из МФТИ найден перспективный вариант использования нанопроводов из золота для реализации сверхпроводниковых аналогов нейронов. По материалам исследований опубликована статья в журнале Nanomaterials. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда. Моделирование нейрофизиологических процессов в мозгу живых существ – задача актуальная и очень сложная. Одной из основных проблем в этой области является недостаточное количество нейронов и синапсов в современных нейроморфных процессорах CMOS (Complementary-Metal-Oxide-Semiconductor), поскольку увеличение ведет к большому энергопотреблению и тепловыделению в таких системах. Авторы исследования разработали джозефсоновские структуры на основе нанопроводов для реализации сверхпроводящих биоинспирированных нейронов, а также схему сверхпроводящего искусственного нейрона, позволяющую работать в режимах, соответствующих важной биологической активности, что отсутствовало в ранее предложенных устройствах. Проведенные

эксперименты показали, что нанопровода из золота могут использоваться как слабая связь для наноразмерных джозефсоновских контактов. Сверхпроводящий контур с двумя такими контактами может работать как «биоподобный» нейрон в быстродействующих и энергоэффективных комплексах моделирования нейрофизиологической активности.



Биологический нейрон и его искусственный аналог из сверхпроводящего материала  
©Nanomaterials

#### Фано-подобный эффект в наноалмазах, покрытых водородом

Наноалмазные частицы, покрытые водородом, обладают рядом необычных свойств: у них отрицательное сродство к электронам и высокая поверхностная электронная проводимость р-типа. В результате проведенных исследований был найден новый эффект: пик прозрачности при  $1328 \text{ см}^{-1}$  в инфракрасном диапазоне. Данный оптический эффект объясняется деструктивной интерференцией типа Фано, возникающей вследствие взаимодействия между оптическими фононами в центре зоны и свободными дырочными носителями в поверхностной области наводороженных нанокристалликов алмаза.

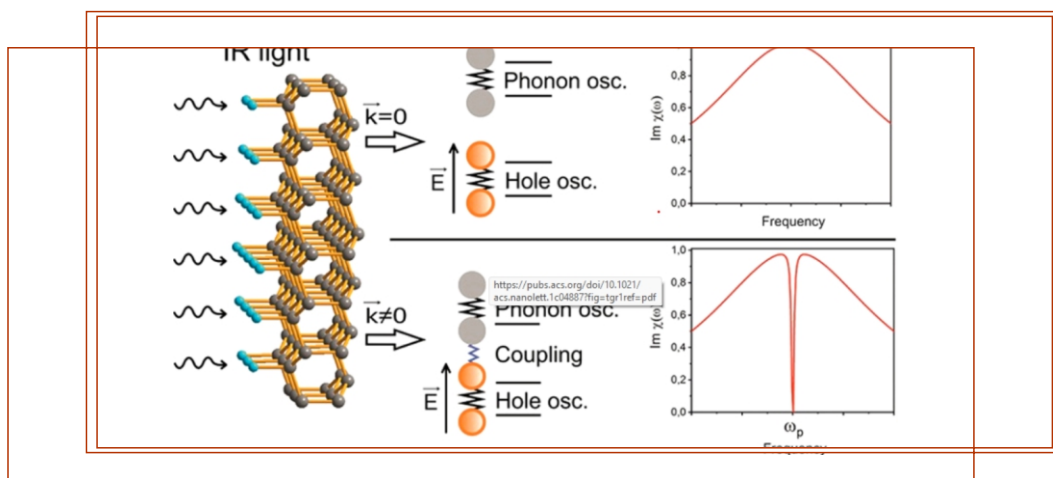
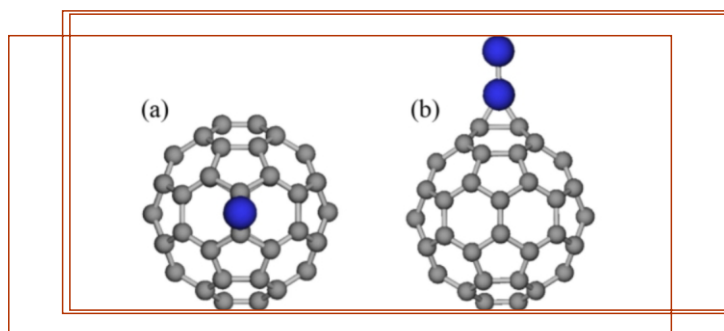


Иллюстрация деструктивной интерференции

### *Множественные положения атомов бора в экзоэдральном и эндоэдральном фуллере $C_{60}$*

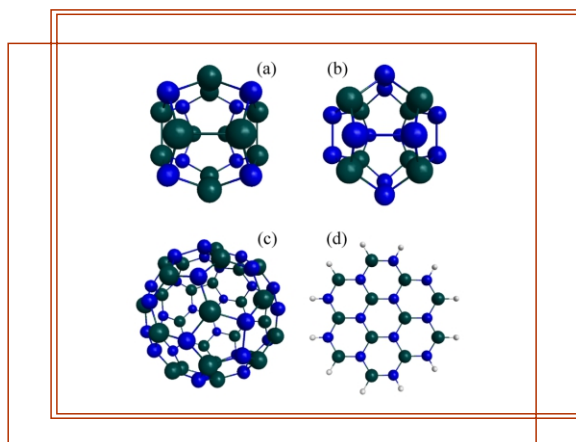
С целью возможного применения фуллера  $C_{60}$  в бор-нейтронозахватной терапии рака теоретически исследовались связанные состояния одного и двух атомов бора как внутри, так и снаружи фуллера  $C_{60}$  методами молекулярного моделирования из первых принципов. Обнаружено, что таких положений довольно много, и их энергии отличаются незначительно. Кроме того, оптимальная конфигурация может меняться, когда, например, к одному атому бора добавляется второй атом бора. В целях идентификации полученных молекулярных комплексов были рассчитаны сдвиги энергии состояний 1 s бора.



*Оптимальная конфигурация двух атомов бора снаружи фуллера  $C_{60}$*

### *Химическая связь между торием и новыми бор-азотными материалами*

Изучались связанные комплексы атома тория с новыми характерными бор-азотными материалами, например, бор-азотными фуллеренами ( $B_{30}N_{30}$ ,  $B_{12}N_8$ ,  $B_8N_{12}$ ) и бор-азотным короненом, представляющим собой фрагмент гексагональной бор-азотной плоскости (hBN). Выбор тория связан с тем, что он обладает исключительным ядерным переходом около 7.8 эВ и потенциально может использоваться в ряде очень важных приложений (например, ядерные часы очень высокой точности и т.д.). Изучение проводилось методами молекулярного моделирования из первых принципов. В результате были найдены оптимальные геометрии связанных комплексов.



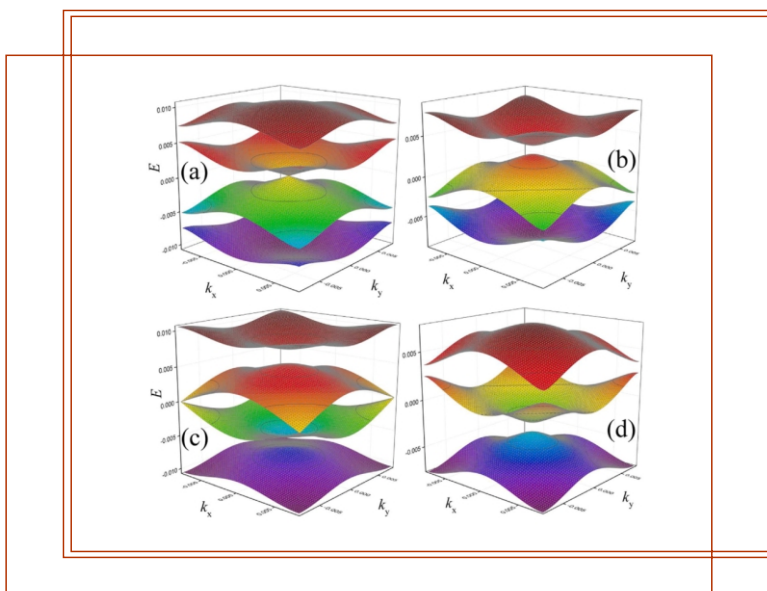
*Новые бор-азотные материалы (BN-фуллерены и hBN), в которые помещался атом тория*

*Возможный переход к несоизмеримой фазе в соединении CoGe (B20), вызванный квадрупольными взаимодействиями*

Германид кобальта CoGe с решеткой типа B20 был исследован путем измерения его теплоемкости и методом ядерного магнитного резонанса. При температуре  $T_Q = 13.7$  К наблюдались аномалии в измеряемых характеристиках, которые можно приписать квадрупольному упорядочению на атомах кобальта и германия. Теоретический анализ показал, что этот переход идет в несоизмеримую структуру.

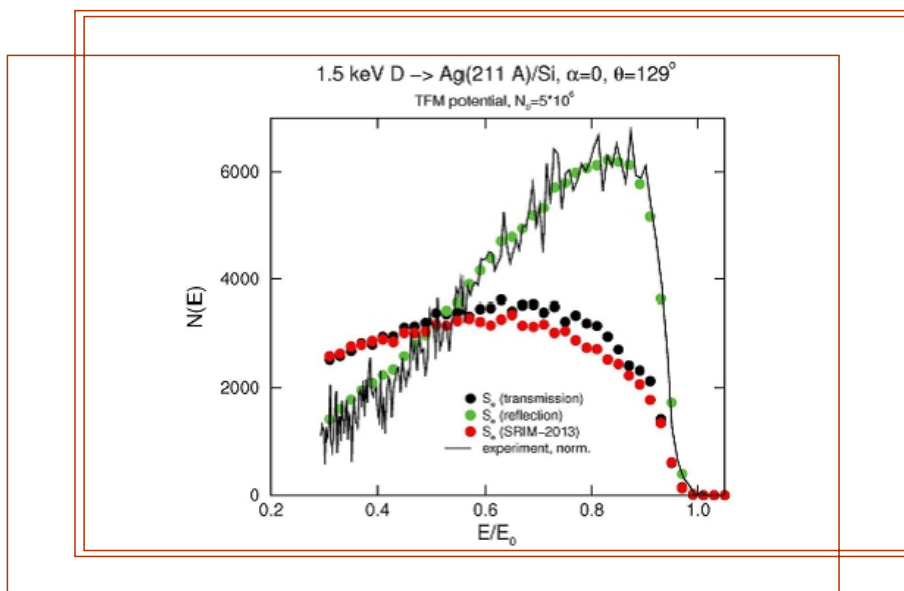
*Аномальное уширение уровней Ландау вблизи энергий седловых точек двумерной квадратной решетки*

Теоретически исследована особенность магнитных состояний (уровней Ландау) в двумерной квадратной решетке, которая может быть реализована в современных нано-гетероструктурах. В такой решетке есть особенности Ван Хофа в электронной плотности состояний, где электронная плотность стремится к бесконечности (на практике образуется узкий пик). Данный пик связан с наличием седловой точки в графике зависимости энергии от импульса в первой зоне Бриллюэна. Было показано, что в условиях внешнего магнитного поля энергия уровней Ландау вблизи седловых точек всегда уширяется и обладает дисперсией. Таким образом, в этих областях энергий предсказано появление магнитных зон электронных состояний (уширенных уровней Ландау) даже при сравнительно небольшом значении магнитного поля.



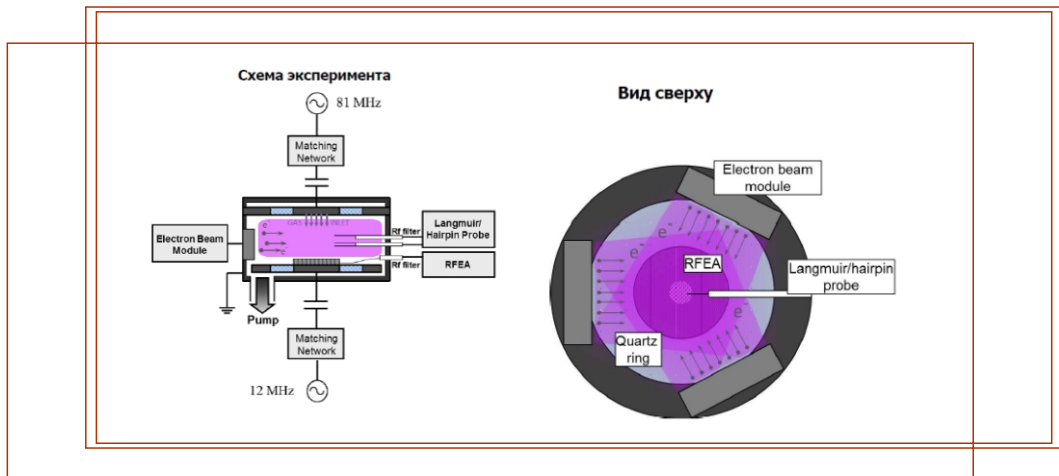
*Дисперсия магнитных зон (уширенных уровней Ландау) вблизи энергий седловых точек*

Методом компьютерного моделирования исследовано влияние электронного торможения на энергетические спектры отраженных ионов при облучении двухслойной мишени Ag/Si ионами дейтерия с энергией 1.5 и 5 кэВ. В расчетах использовались различные зависимости сечения  $S_e(E)$  электронного торможения в серебре (кремнии) в зависимости от энергий частиц  $E$ . Для пары D –Ag наилучшее согласие с экспериментом дали результаты, полученные методом отражения (зеленые кружки на рис.) с помощью компьютерной программы TRBS по сравнению с методом прохождения (черные кружки). Показано, что зависимость  $S_e(E)$ , генерируемая программой SRIM-2013 (красные кружки), существенно завышает торможение изотопов водорода в серебре в области низких энергий. В этой области энергий форма энергетического спектра зависит от использованного в расчете межатомного потенциала. Хорошее согласие с экспериментом получено, в частности, для потенциала Томаса-Ферми-Мольера с длиной экранирования Линдхарда.



*Воздействие электронного пучка на двухчастотную емкостную ВЧ-плазму:  
эксперимент и моделирование*

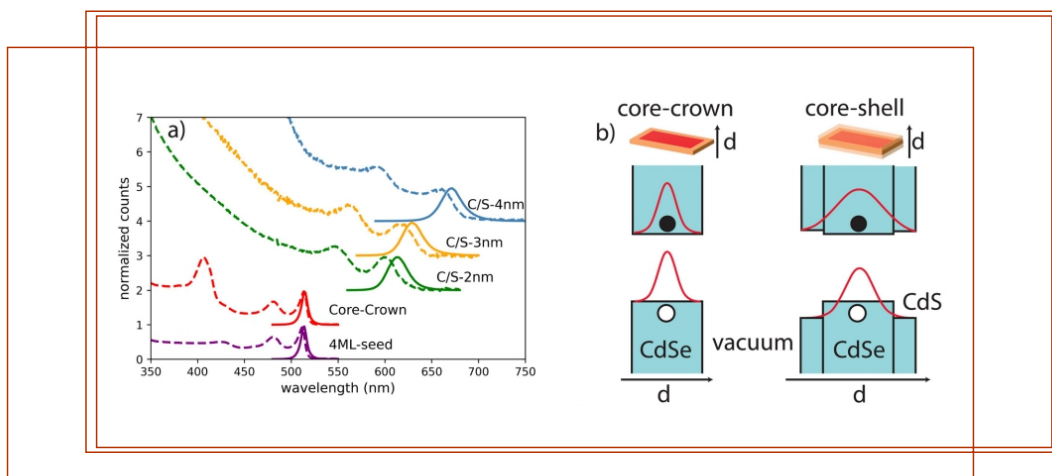
Одной из важнейших задач, стоящих перед современной микроэлектроникой, является обеспечение плазменной обработки поверхности на уровне одного атома. Чтобы свести к минимуму дефекты в нижележащих слоях, эти процессы требуют ионов с очень низкими энергиями – ниже, чем в обычной радиочастотной (РЧ) плазме, и близко к энергии связи атомов. В качестве возможного решения этой проблемы рассматривался традиционный двухчастотный емкостный (DF ССР) ВЧ-разряд с дополнительной ионизацией электронным пучком. Было исследовано влияние электронного луча на параметры 81 и 12 МГц плазмы, такие как функция вероятности энергии ионов на электроде с ВЧ-смещением. Экспериментальная часть исследования включала в себя измерения, проведенные в асимметричном DF ССР-разряде в Ag при давлении 100 мТорр с использованием ленгмюровского зонда, зонда-шпильки и анализатора энергии задерживающего поля. Поведение параметров плазмы рассмотрено в различных типах плазмы: в электронно-лучевой плазме без подачи ВЧ-мощности, а также в ВЧ-плазме с электронным пучком и без него. Для анализа воздействия электронного пучка на DF РЧ-плазму использовалось моделирование 1D PIC MCC. Полученные результаты показали, что температура электронов и, соответственно, энергия ионов, поступающих на поверхность электрода, может быть снижена. Использование электронного пучка в разряде DF ССР позволяет управлять плотностью плазмы, температурой электронов и энергетическим спектром ионов в области низких энергий, что может представлять существенный интерес для технологий атомно-слоевого травления и атомно-слоевого осаждения.



*Двухчастотный ВЧ-разряд: HF – 81 МГц, LF – 12 МГц. Газ – Ag. Давление – 100 мТор.  
Электронный пучок – пучок «убегающих» электронов  $E_b \sim 1.5$  кэВ, генерируемый  
тремя модулями открытого разряда. Открытый разряд – DC напряжение  
на промежутке заземленная сетка – катод ( $V = -1.5$ кВ)*

*Изменение характера взаимодействия экситонов в зависимости от типа оболочки в нанопластиках на основе CdSe – перспективных наноматериалах для регистрации ионизирующего излучения*

Были рассмотрены процессы возбуждения наночастиц на основе CdSe сложной геометрии под действием интенсивного лазерного излучения с длиной волны 405 нм и рентгеновского излучения со средней энергией квантов порядка 20 кэВ. Рассматривались наночастицы, представляющие собой нанопластины из четырех с половиной слоев CdSe с размерами в плоскости пластинки от 20 до 40 нм, либо пассивированные по краю «короной» CdS, либо покрытые со всех сторон оболочкой CdZnS. Толщина нанопластинок с оболочкой составляла от 2 до 4 нм. Электронная волновая функция в экситонах в нанопластинках с оболочкой захватывает область оболочки, в то время как дырочная волновая функция сосредоточена в ядре CdSe. Это определяет существенную разницу в экситонных состояниях в нанопластинках с короной и нанопластинках с оболочкой, что проявляется в принципиально различном поведении биэкситонных состояний. Экспериментальные результаты показывают, что при повышении интенсивности оптического возбуждения и при рентгеновском возбуждении в нанопластинках с короной наблюдается полоса биэкситонов с красным смещением, что соответствует притяжению экситонов при образовании биэкситона, в то время как в нанопластинках с оболочкой экситоны расталкиваются, что приводит к повышению энергии биэкситона по сравнению с удвоенной энергией экситонов. Последний эффект растет с ростом толщины оболочки, то есть с увеличением проникновения электронной волновой функции в оболочку. Такое различие свойств экситонов связано с конкуренцией притягивающего диполь-дипольного (ван-дер-ваальсовского) взаимодействия экситонов и кулоновского отталкивания, которое растет с ростом квадрупольного момента экситона (с увеличением различия в распределении электронов и дырок). Это же различие проявляется в неэкспоненциальной кинетике люминесценции. Быстрая компонента люминесценции растет с ростом интенсивности возбуждающего оптического излучения или при переходе к рентгеновскому возбуждению. Было оценено распределение числа возбуждений в нанопластинках разного размера, которые создаются пролетающими через нанопластины вторичными электронами после поглощения рентгеновского кванта. Результаты работы важны для разработки наночастиц, обладающих пикосекундной люминесценцией, которые предполагается использовать для новых композитных материалов при детектировании ионизирующих частиц со сверхбыстрым временным разрешением.

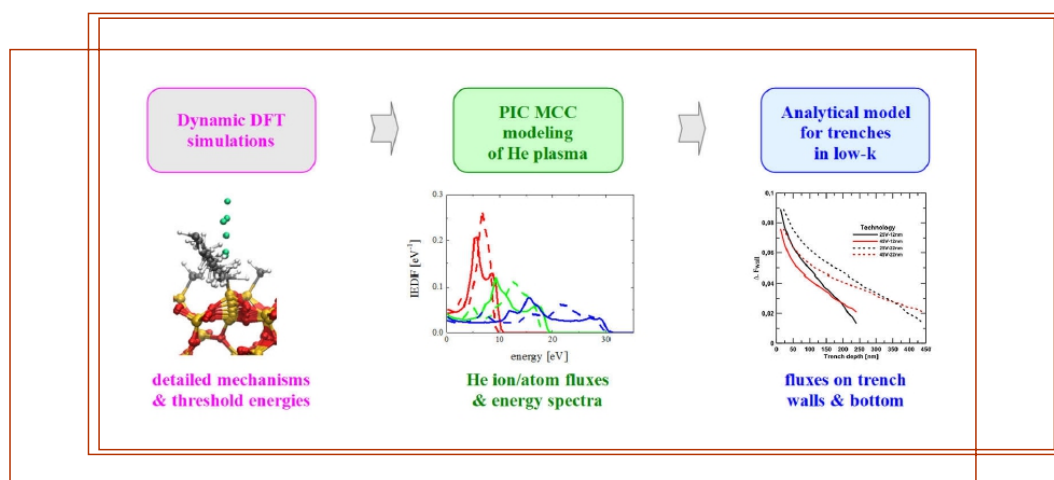


*Спектры поглощения (пунктир) и экситонной люминесценции нанопластинок с «короной» (core-crown) и с оболочкой (core-shell, C/S) различной толщины (a). Распределение электронной (сверху) и дырочной (внизу) плотности в экситоне в нанопластинке с короной и с оболочкой (b)*



*Многомасштабное моделирование функционализации поверхности low-k диэлектриков в тренчах высокочастотной плазмой с электронным пучком*

Чтобы определить оптимальные условия для функционализации low-k диэлектриков в электронно-лучевом rf-разряде, генерируемом электронным пучком с энергией 1 кэВ в He, применен комплексный подход к моделированию. Для этого выполнено объединение моделей различного уровня. Возможность и механизмы удаления метильных групп с low-k поверхностей низкоэнергетическими ионами гелия и быстрыми атомами гелия исследовалась с помощью моделирования на основе ab initio динамической теории функционала плотности (DFT). Влияние давления газа, rf-напряжения и rf-частот на функции распределения энергии и угловое распределение ионов анализировалось с использованием одномерной кинетической модели Particle-in-Cell на основе метода Монте-Карло (PIC MCC). Оценен относительный вклад быстрых атомов в функционализацию поверхности. Потоки ионов на стенках и дне тренчей были вычислены с помощью разработанного 2D аналитического подхода.



*Цифровая медицина, новые результаты внедрения в практическую медицину*

В НИИЯФ МГУ совместно с группой компаний «Гаммамед» и АО «Концерн ВКО «Алмаз-Антей»» была разработана оптическая навигационная система «Мультитрек», предназначенная для выполнения нейрохирургических операций на головном мозге и на позвоночнике. В 2022 г. проводилось совершенствование системы и развитие ее функциональных возможностей. Последние запуски системы в эксплуатацию были выполнены в НИИ СП имени Н.В. Склифосовского, НИИ педиатрии и детской хирургии имени Ю.Е. Вельтищева, четырех клиниках Министерства обороны, ФМБА НИИ мозга и нейротехнологий, ФМБА НМИЦ оториноларингологии.



*Операция шунтирования 7-месячному ребенку в НИИ педиатрии детской хирургии имени Ю.Е. Вельтищева, проведенная доктором М.Ю. Владимировым с помощью хирургической навигационной системы «Мультитрек»*

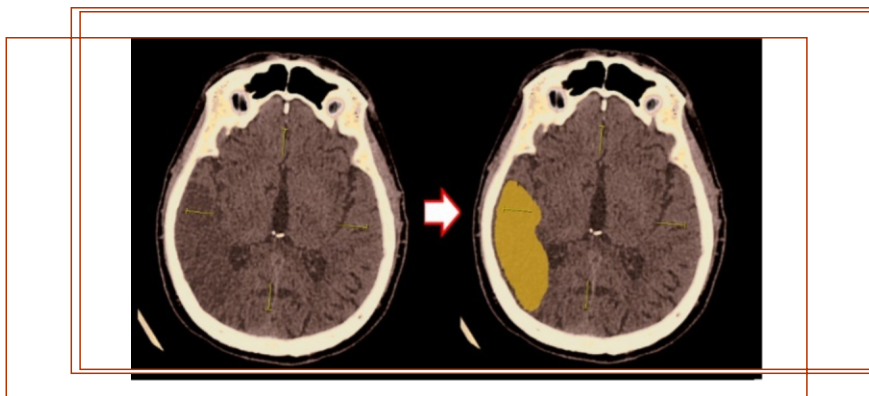
*Программный модуль для автоматического анализа изображений компьютерной томографии головного мозга при ишемическом инсульте*

Лаборатория медицинских компьютерных систем НИИЯФ МГУ недавно анонсировала свою новейшую разработку в области анализа медицинских изображений: программный модуль, обеспечивающий автоматический анализ изображений компьютерной томографии головного мозга при ишемическом инсульте.

Основным методом лучевой диагностики инсульта является компьютерная томография. Проведение исследования позволяет исключить наличие кровоизлияний, однако точное определение объема ишемизированных, то есть оставшихся без кровоснабжения, участков довольно проблематично. В первые часы после появления неврологической симптоматики, именно тогда, когда дорога каждая секунда и нужно быстро принять решение о способе лечения, прямые признаки ишемии могут отсутствовать на КТ-изображениях. В случаях, когда их удается визуализировать, врач-радиолог должен определить их точную локализацию и оценить тяжесть поражения с помощью специальной балльной шкалы ASPECTS. Именно на основе этого балла и принимается тактическое решение о способе лечения пациента.

Новая разработка лаборатории, выполненная совместно с НИИ скорой помощи имени Н.В. Склифосовского и ООО «Гаммамед-Софт», обеспечивает полностью автоматическую обработку КТ-изображений головного мозга без каких-либо дополнительных действий со стороны пользователя. В результате применения искусственных нейронных сетей и специальных методов обработки радиологических изображений были созданы алгоритмы, позволяющие сегментировать участки, соответствующие шкале ASPECTS, детектировать признаки ишемии и вычислять объем поражения с последующей оценкой балла ASPECTS.

Подобная разработка обеспечит поддержку врачей-радиологов, работающих как в инсультных центрах, так и в больницах общего профиля, и в целом позволит оптимизировать процесс оказания помощи пациентам с ишемическим инсультом. Материалы были доложены на ежегодном конгрессе «Информационные технологии в медицине», проходившем в Москве с 13 по 14 октября. В настоящее время ведутся работы по интеграции программы с единым радиологическим сервисом г. Москвы для обслуживания больниц города.

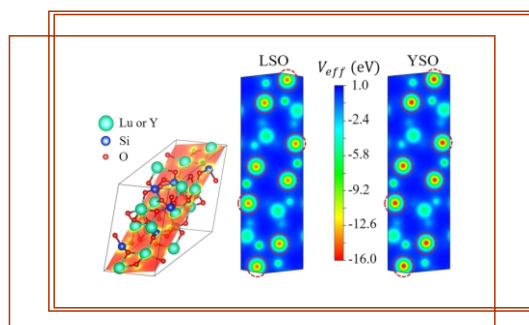


Результат применения алгоритма автоматического определения участков ишемии

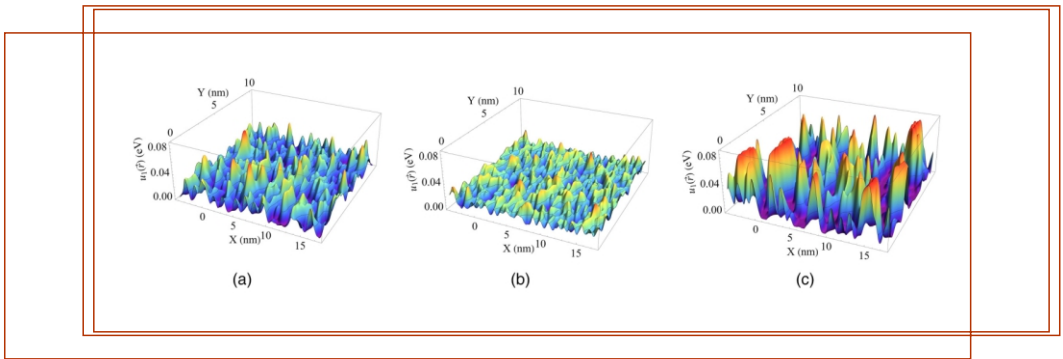
## Взаимодействие излучений с веществом

*Влияние беспорядка замещения на миграцию носителей заряда в сцинтилляционных кристаллах лютеций-иттриевого ортосиликата*

Для изучения переноса возбуждения и временных свойств оксиортосиликата лютеция-иттрия (LYSO) разработано общее описание динамики неравновесных носителей в многокомпонентных активированных сцинтилляционных материалах с композиционным беспорядком кристаллической матрицы. Энергетическая структура, плотность состояний и эффективный потенциал кристаллов LSO и YSO были рассчитаны с использованием пакета Quantum Espresso. Пространственное распределение катионов лютеция и иттрия в кристалле LYSO было смоделировано методом Монте-Карло с использованием термодинамического подхода для трех качественно различных случаев распределения катионов: однородного, гетерогенно-соседнего и кластерного. Установлено, что влияние композиционного беспорядка на миграцию электронов качественно различно в четырех типичных областях энергии электронов. Плотность локализованных состояний в LYSO, рассчитанная с использованием приближения когерентного потенциала (CPA) и квазиклассического подхода, сравнима с плотностью вторичных носителей, ожидаемой в треке ионизации, и может иметь существенное влияние на миграцию термализованных носителей. Показано, что транспортная длина свободного пробега нелокализованных электронов, ограниченная упругим рассеянием на флуктуациях псевдопотенциала, существенно больше, чем за счет испускания продольного оптического фонона в области низких энергий (рассчитано с помощью CPA) и области высоких энергий (рассчитано с помощью приближения Борна).



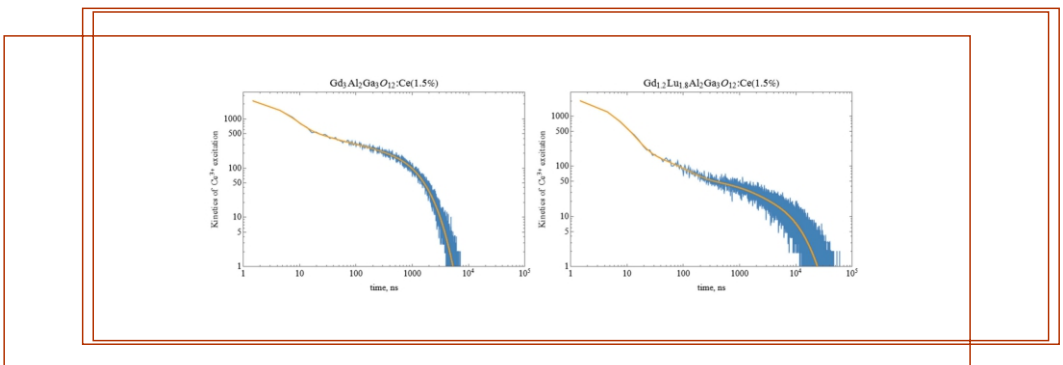
*Распределение эффективного потенциала в LSO и YSO в одной и той же кристаллической плоскости (показанной слева), рассчитанной с использованием пакета Quantum Espresso*



Пространственное распределение низкочастотной части полного псевдопотенциала для однородного (а), антикоррелированного и кластеризованного распределения ионов для концентрации иттербия 20%

*Исследование замещения ионов гадолиния более тяжелыми ионами лютетия в керамиках эффективного сцинтиллятора*

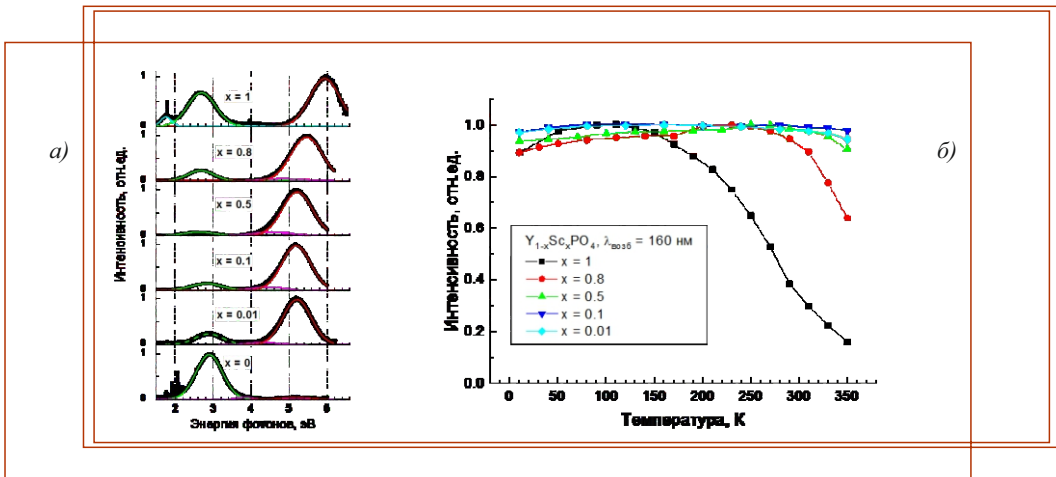
Рассмотрены технологические факторы и процессы, вносящие вклад в механизм сцинтилляций в керамике четырехкатионного граната, легированного церием (Gd, Lu)<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>Ga<sub>3</sub>O<sub>12</sub>:Ce. Было обнаружено, что сверхстехиометрическая добавка гадолиния в состав материала или его совместное легирование магнием с низкой концентрацией эффективно подавляют фосфоресценцию в таком гранате. Моделирование передачи электронного возбуждения методом Монте-Карло показывает, что прыжковая миграция по подрешетке гадолиния играет существенную роль в формировании кинетических параметров сцинтилляций. Частичное замещение гадолиния более тяжелыми ионами лютетия увеличивает роль автолокализации при возбуждении ионов Ce<sup>3+</sup>, что обеспечивает как увеличение доли коротких (~20 нс), так и очень длинных (~600 нс) компонент в кинетике сцинтилляций.



Кинетика сцинтилляционного отклика граната со 100% гадолиния (слева) и замещением 60% гадолиния лютетием (справа), рассчитанная с учетом миграции энергии при передаче церию по подрешетке гадолиния: в керамиках с замещением гадолиния лютетием растет вклад быстрой компоненты и снижается доля медленной (с появлением компонент со временами порядка 600 нс)

Люминесцентные и структурные свойства ярких УФ-С фосфоров с отличной температурной стабильностью на основе твердых растворов  $Y_{1-x}Sc_xPO_4$

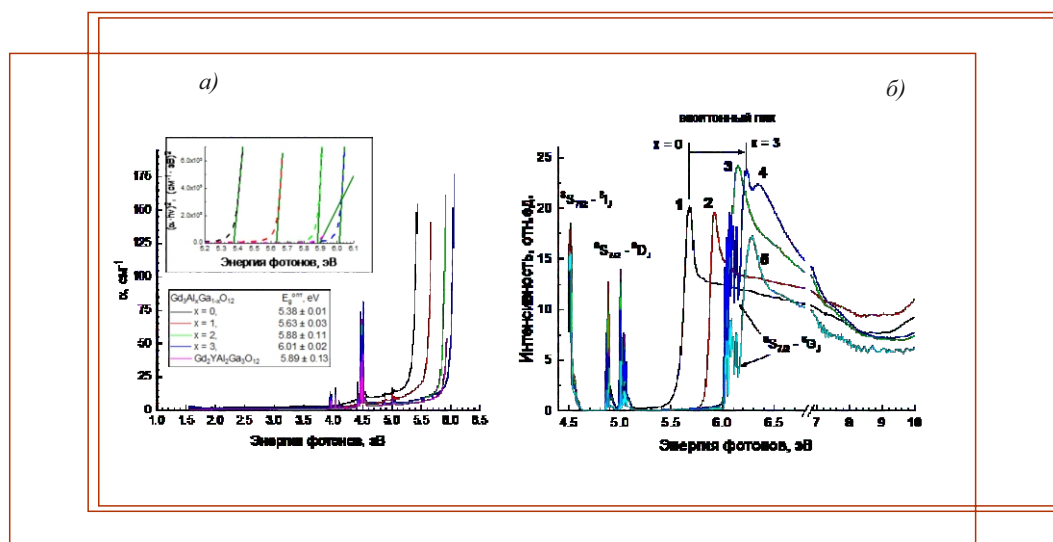
Были изучены структурные и люминесцентные свойства твердых растворов  $Y_{1-x}Sc_xPO_4$ , как беспримесных, так и легированных ионами  $Eu^{3+}$ . Зарегистрирована интенсивная температуростабильная люминесценция с быстрыми временами затухания ( $10^{-7}$  с) и положением полосы свечения, изменяющимся в диапазоне от 5.21 до 5.94 эВ в зависимости от соотношения Sc/Y, которая связана с излучением 2p O – 3d Sc автолокализованных экситонов. Квантовый выход этой люминесценции также зависит от соотношения Sc/Y и достигает 34% для твердых растворов с  $x = 0.5$  при 300 К. Совместный анализ теоретических расчетов и экспериментальных данных показал, что в исследованных твердых растворах происходит формирование скандиевых кластеров. Такие кластеры способствуют созданию энергетических колодцев на дне зоны проводимости, что способствует глубокой локализации электронных возбуждений и созданию центров УФ-С люминесценции, характеризующихся высокими квантовым выходом и температурной стабильностью. Полученные результаты показывают, что твердые растворы  $Y_{1-x}Sc_xPO_4$  могут рассматриваться в качестве ярких УФ-С фосфоров с достаточно быстрыми временами затухания и отличной температурной стабильностью в условиях окружающей среды.



а) Спектры фотолюминесценции  $Y_{1-x}Sc_xPO_4$  при  $E_{возб} = 7.75$  эВ (160 нм),  $T = 300$  К. Разложение спектра на гауссианы представлено цветными линиями. б) Температурные зависимости УФ-С люминесценции в  $Y_{1-x}Sc_xPO_4$  при  $E_{возб} = 7.75$  эВ (160 нм). Экспериментальные точки были получены путем интегрирования сигнала люминесценции в диапазоне 190-265 нм ( $x = 1$ ), 190-290 нм ( $x = 0.8$ ) и 190-310 нм ( $x = 0.05, 0.1$  и  $0.01$ )

*Структурные, оптические и люминесцентные свойства беспримесных монокристаллов  $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) и  $Gd_2YAl_2Ga_3O_{12}$*

Исследованы структурные, оптические и люминесцентные свойства беспримесных смешанных кристаллов гранатов  $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) и  $Gd_2YAl_2Ga_3O_{12}$ . Элементный состав и параметры решетки смешанных кристаллов были уточнены с помощью методов EDX и XRD. Уточнение кристаллической структуры было выполнено с использованием метода Ритвелда, и было показано, что катионы Al предпочитают занимать позиции В с октаэдрической координацией, тогда как катионы Ga с большей вероятностью занимают позиции С с тетраэдрической координацией. Коэффициенты преломления были определены экспериментально и аппроксимированы с использованием уравнения Коши. Значения оптической запрещенной зоны были оценены с использованием спектров поглощения. Температурная зависимость края фундаментального поглощения аппроксимирована формулой Урбаха только для крайнего состава  $Gd_3Ga_5O_{12}$ , тогда как для смешанных кристаллов граната аппроксимация не удалась из-за частичного разупорядочения кристаллической структуры, а также искажения края фундаментального поглощения переходами  $^8S_0 - ^6G_J Gd^{3+}$ . С помощью люминесцентной спектроскопии показано наличие двух неэквивалентных позиций  $Gd^{3+}$  в решетке граната. Исследована температурная стабильность люминесценции  $Gd^{3+}$  и определены энергии активации температурного тушения. Из спектров возбуждения люминесценции определены энергии создания экситонов и оценены энергии запрещенной зоны.



а) Спектры поглощения смешанных кристаллов  $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$  и  $Gd_2YAl_2Ga_3O_{12}$ . На вставке представлены построения Таука (сплошные линии) и аппроксимация оптической ширины запрещенной зоны (прерывистые линии).

б) Спектры возбуждения люминесценции монокристаллов  $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$  ( $x = 0$ , кривая 1;  $x = 1$ , кривая 2;  $x = 2$ , кривая 3;  $x = 3$ , кривая 4) и  $Gd_2YAl_2Ga_3O_{12}$  (кривая 5)

при  $\lambda_{свеч} = 316.5 \text{ нм}$ ,  $T = 7 \text{ К}$

*Люминесцентные свойства и радиационная стойкость сцинтилляционных кристаллов  $(Gd, Ce)_3(Al, Ga, Sc)_5O_{12}$*

Проведено исследование влияния частичного замещения катионов Al и Ga катионами Sc на структуру, строение энергетических зон и люминесцентные свойства кристаллов и керамик GAGG:Ce и влияние катионного состава беспримесных смешанных кристаллов гранатов  $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) на полосы наведенного поглощения под воздействием протонного облучения. Частичное замещение катионов  $Al^{+3}$  и  $Ga^{+3}$  катионами  $Sc^{+3}$  в кристаллах GAGG:Ce приводит к появлению дополнительных каналов переноса энергии на центры свечения  $Ce^{+3}$ . Это выражается в усилении интенсивности свечения  $Ce^{+3}$  в условиях отсутствия температурного тушения и подавления вклада медленных компонент в кинетике затухания  $Ce^{+3}$  за счет уменьшения времени переноса энергии возбуждений на церий. Показано, что интенсивность полос наведенного поглощения кристаллов  $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) в области свечения  $Ce^{+3}$  уменьшается по мере замещения галлия алюминием, что может быть связано как с улучшением радиационной стойкости кристаллов, так и с меньшей начальной концентрацией дефектов в кристаллах с более высоким содержанием алюминия.

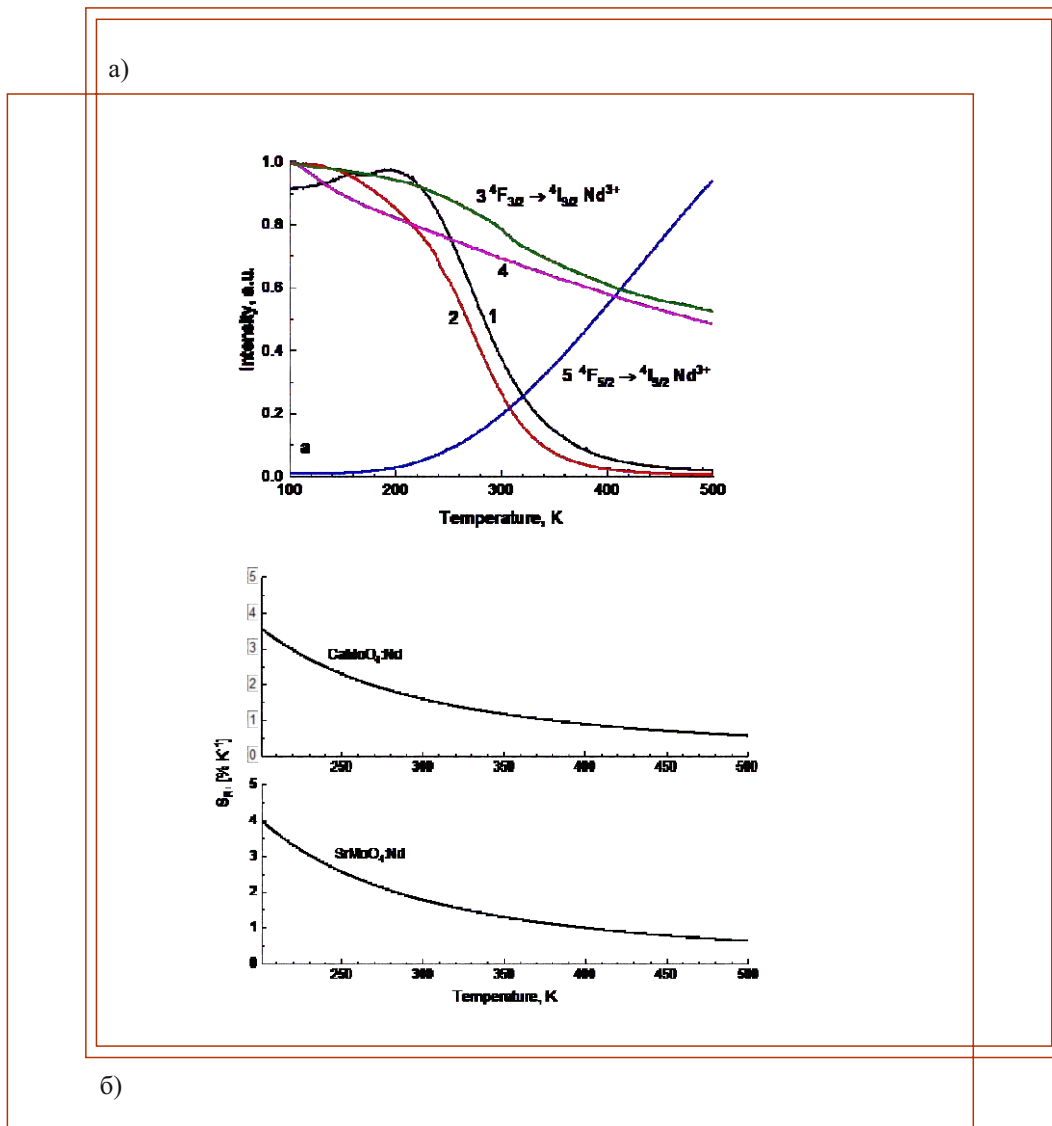


*Установка для люминесцентной спектроскопии отдела физических проблем квантовой электроники НИИЯФ МГУ. Энергетический диапазон 2 – 6 эВ*

*Влияние температуры на люминесцентные свойства кристаллов  $CaMoO_4$  и  $SrMoO_4$ , беспримесных и легированных  $Nd^{3+}$*

Изучены люминесцентные свойства молибдатов кальция и стронция, беспримесных и активированных ионами неодима. На основе анализа температурных зависимостей спектров люминесценции и кинетик затухания показано влияние температуры на процессы переноса энергии от центров собственного свечения на активатор. Показано, что их результатом являются уменьшение энергии активации температурного тушения экситонного свечения, сопровождающееся ростом интенсивности примесного свечения для  $CaMoO_4:Nd^{3+}$ , а также ускорение времени затухания экситонной люминесценции, при этом в случае молибдата кальция кинетика перестает быть одноэкспоненциальной. Показано, что температура влияет на интенсивность переходов  ${}^4F_{5/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$  и  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$ . По соотношению интенсивностей этих переходов, определены значения относительной температурной чувствительности  $CaMoO_4:Nd^{3+}$  и  $SrMoO_4:Nd^{3+}$ , которые составили 1.73 и 1.78%/K, соответственно.

Сделано предположение о возможности создания бесконтактного люминесцентного датчика температур с расширенным рабочим диапазоном с использованием  $\text{CaMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$  и  $\text{SrMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$ .



- a) Температурная зависимость интенсивности люминесценции  $\text{CaMoO}_4$  (1) и  $\text{CaMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$  (2-5) при  $\lambda_{\text{возб}} = 290$  нм,  $\lambda_{\text{свеч}} = 550$  нм (1, 2) и  $\lambda_{\text{свеч}} = 900$  нм (3);  $\lambda_{\text{возб}} = 461$  нм,  $\lambda_{\text{свеч}} = 900$  нм (4) и  $\lambda_{\text{свеч}} = 820$  нм (5);
- б) Относительная температурная чувствительность  $\text{CaMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$  и  $\text{SrMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$  для переходов  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$  и  ${}^4F_{5/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$  в ионах  $\text{Nd}^{3+}$  при  $\lambda_{\text{возб}} = 461$  нм.



### Навигационная система «Мультитрек»

В марте 2022 г. состоялось заседание президиума РАН по вопросам импортозамещения медицинских изделий фирм зарубежных производителей. Одним из вопросов, рассматриваемых на заседании, было обсуждение системы «Мультитрек». С докладом по результатам использования системы в условиях нейрохирургической операционной выступил главный внештатный нейрохирург МЗ РФ, академик РАН В.В. Крылов, содокладчик – заведующий лабораторией НИИЯФ МГУ А.В. Гаврилов. Во время презентации доклада на целом ряде примеров использования системы при выполнении различных типов нейрохирургических операций на головном мозге была продемонстрирована ее высокая точность и надежность в работе. Было показано, что реализованные возможности работы системы «Мультитрек» не уступают зарубежным аналогам, а ее стоимость в 2.5 – 3 раза ниже. В докладе отмечено, что намеченные разработчиками перспективы по развитию функциональных возможностей системы, включая выполнение операций на позвоночнике, ЛОР-операций, челюстно-лицевых операций, ортопедических и травматологических операций при обеспечении ее совместной работы с интраоперационными микроскопами, рентгеновскими приборами, интраоперационными КТ и МРТ, приборами УЗ диагностики и эндоскопами, позволят не только полностью заменить зарубежные системы, но и значительно превзойти их возможности.

Президиум РАН в Постановлении от 22 марта 2022 г. поддержал необходимость серийного выпуска и доработки системы «Мультитрек» для развития ее функциональных возможностей и решил обратиться в Правительство Российской Федерации с предложением принять меры по серийному выпуску аппаратов «Мультитрек» в количестве не менее 50 единиц в год.



9 ноября Президент России В.В. Путин приехал в Федеральный центр мозга и нейротехнологий Федерального медикобиологического агентства и ознакомился с новейшими технологиями лечения и реабилитации, в том числе с навигационной системой «Мультитрек». Президенту показали операционную, в которой при операциях на головном мозге используется эта система.

## Кандидатские диссертации

*физико-математические науки*

**Ружницкий Всеволод Игоревич;** диссертация на тему «Новые физические подходы к решению задачи масштабирования элементной базы цифровой сверхпроводниковой электроники»; специальность 01.04.15 – Физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика. Работа была выполнена в МГУ имени М.В. Ломоносова. Защита состоялась 19 января в диссертационном совете МГУ.01.05.

**Пластинин Иван Владимирович;** диссертация на тему «Лазерная спектроскопия самоорганизации амфифильных соединений в растворах»; специальность 01.04.05 – Оптика. Работа была выполнена в МГУ имени М.В. Ломоносова. Защита состоялась 14 апреля в диссертационном совете МГУ.013.6(01.08).

Для заметок



Для заметок

