



Основные научные результаты за 2025 г. Отделения перспективных разработок

А. В. Титов

Ученый совет НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

22.01.2026

Гатчина



Структура Отделения перспективных разработок

6 отделов, в которые входят 6 лабораторий и >12 групп:

- Отдел наноструктурированных материалов (ОНСМ, зав. кхн **М.Е. Взнуздаев**):
 - **ЛХСУМ** (зав. кфмн **М.В. Суясова**);
 - **ГКН** (группа композитных наноматериалов, рук. кфмн **А.А. Борисенкова**);
 - **ГРММ** (группа радиационного модифицирования мат-лов, рук. кхн **Ж.Б. Лютова**);
 - **ГТСНМ** (группа технологии синтеза новых материалов, рук. **В.П. Седов**).
- Отдел оптических и информационных технологий (ООИТ, зав. ктн **А.С. Кадыров**):
 - **ГЛГИИС** (рук. **Л.В. Константинов**);
 - **ГФФ** (группа фотофизики, рук. дфмн **Н.В. Каманина**).
- Отдел квантовой физики и химии (ОКФХ, и.о. зав. **А.В. Титов**):
 - **ЛКХ** (зав. кхн, дфмн **А. Н. Петров**) & 7 теор. групп (10 основных направлений).
- Ускорительный отдел (УО, зав. кхн **В.И. Максимов**):
 - **ЛФТУ**: лаборатория физики и техники ускорителей (и.о. зав. кфмн **С.А. Артамонов**);
- Отдел прикладной ядерной физики (ОПЯФ, зав. кфмн **А.С. Воробьев**):
 - **ЛЭПО** (лаборатория электронного и программного обеспечения, зав. ктн **К.Н. Ермаков**);
 - **ЛРФ** (лаборатория радиационной физики, зав. кфмн **А.С. Воробьев**).
- Отдел информационных технологий и автоматизации (ОИТА, зав. **С.Б. Олешко**):
 - **ЛИВС**: лаборатория информационно-вычислительных систем (и.о. зав. **С.Б. Олешко**).

Количественный состав работников ОНР по лабораториям/отделам

	на декабрь 2023 г.	на декабрь 2024 г.	на декабрь 2025 г.	за 2025 г.
<u>ОНР:</u>	Кол-во работников	Кол-во работников	Кол-во работников	Прирост
ОИТА (включая ЛИВС)	16	16	16	0
ООИТ (включая ГЛГИИС)	25	27	22	-5
ОКФХ (включая ЛКХ и 3-х сотр. АУ ОНР)	34	42	40	-2
ОПЯФ (включая 1-го сотр. АУ ОНР)	16	17	17	0
ОНСМ (включая ЛХСУМ)	17	23	24	1
Ускорительный отдел (ЛФТУ+ЦЭУ)	45	49	43	-6
ВСЕГО:	153	174	162	-12

Средний возраст работников ОНР

	на декабрь 2023 г.	на декабрь 2024 г.	на декабрь 2025 г.	за 2025 г.
<u>ОНР:</u>	Средний возраст, лет	Средний возраст, лет	Средний возраст, лет	Прирост
ОИТА (включая ЛИВС)	63	64	65	1
ООИТ (включая ГЛГИИС)	55	52	49	-3
ОКФХ (включая ЛКХ и 3-х сотр. АУ ОНР)	36	34	36	2
ОПЯФ (включая 1-го сотр. АУ ОНР)	67	63	64	1
ОНСМ (включая ЛХСУМ)	35	35	37	2
Ускорительный отдел (ЛФТУ+ЦЭУ)	58	58	58	0
Средний возраст работников ОНР (лет):	52	51	52	1



Учёные степени научных сотрудников ОПР на дек. 2025 г. («прирост» за год)

<u>ОПР:</u>	Доктора наук (прирост)	Кандидаты наук (прирост)
ОКФХ	7 (+2)	13 (+2-1д)
ОПЯФ	1	5
ООИТ	1 (-1)	5 (+1)
ОНСМ	1 (+1)	4
УО (ЛФТУ)	1 (+1)	3 (-1д)
ИТОГО:	11 (+3)	30 (+3к-2д)



Гранты ОНР (2025)

лабора- тория/ отдел		руководитель проекта	номер проекта	название проекта	2023	2024	2025	2026
ОКФХ	РНФ	Титов А.В.	20-13-00225	Развитие средств релятивистского моделирования материалов с примесными f-элементами и исследование их электронной структуры				
ОКФХ	РНФ	Титов А.В.	20-13-00225-П		7 000 000	7 000 000		
ОКФХ	РНФ	Скрипников Л.В.	19-72-10019	Теоретическое исследование свойств и структуры ядер с использованием атомно-молекулярных систем				
ОКФХ	РНФ	Скрипников Л.В.	19-72-10019-П		5 750 000	3 000 000		
ОКФХ	РНФ	Петров А.Н.	18-12-00227-П	Поиск новой физики на молекулах				
ОКФХ	РНФ	Петров А.Н.	24-12-00092	Эффекты нарушения пространственной четности и временной инвариантности в молекулах		7 000 000	7 000 000	7 000 000
ОКФХ	РНФ	Олейниченко А.В.	24-73-00076	Методы тензорного разложения для высокоточного релятивистского моделирования электронной структуры и свойств материалов на основе f-элементов		1 500 000 / 1 500 000		
					12 750 000	18 500 000	8 500 000	7 000 000

Рост средней заработной платы ОНР (2025 vs. 2024 гг.)

ОНР:	ВСЕГО	Прирост	Бюджетные средства	Прирост	Внебюдж. средства	Прирост
ОНР за 2024	71 217	13 348	52 026	2 981	19 191	10 367
ОНР за 2025	86 678	15 461	54 018	1 992	32 660	13 469

Средняя заработная плата по категориям (за январь-декабрь 2025г.)

ОНР:	ВСЕГО	«Прирост»	Бюджетные средства	Прирост	Внебюджетные средства	«Прирост»
Руководители	123 457	10 715	101 213	7 404	22 244	3 311
Научные сотрудники*	85 752	-6 511	60 075	-2 166	25 677	-4 345
ИТР (специалисты)	75 589	28 410	35 653	-3 694	39 936	32 104
Рабочие	34 241	-4 166	31 792	-1 741	2 449	-2 425

*) Большая часть научных сотрудников переведена на неполные ставки, их реальная з/п существенно ниже.

Фонд оплаты труда ОНР

	2020 г.	2021/ 2024 г.	2025 г.	Прирост
Фонд оплаты труда (руб. в мес.)	3 765 700	3 794 500	4 221 100	426 600
Численность (штат + совм.)	142+27	133+23	140+33	7+10



Публикации ОНР за 2025

Подразделение	Публикации	WoS/Scopus	РИДы
2025 (2024)			
ОКФХ(ЛКХ)	35 (36)	35[25:Q1] (35[24]) но 1 – в Nature (IF=49) & 1 – в Science (IF=57) & 1 – в Phys.Rep. (IF=30)	5 (5)
ОПЯФ (ЛРФ+ЛЭПО)	2 (4)	2 (3)	0 (1)
УО	3 (6)	1 (1)	0 (1)
ОНСМ(ЛХСУМ+ 3 группы)	5 (8)	5 [2:Q1] (7)	0 (0)
ООИТ(гр.Кама- ниной+ЛГИИС)	9 (13)	6 (12)	0 (0)
<u>ВСЕГО:</u>	54 (63)	49 (54)	5 (7)

Участие ОНР в конференциях-совещаниях-школах:

всего было (не менее) **14 мероприятий** и **60 докладов** от ОНР (1 диплом).

Организация конференций:

- школа-конф. по современной хим. физике в СПб (совм. с ТУ+) ~20 участников;
- две секции на Зимней школе ПИЯФ (~60 участников).



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

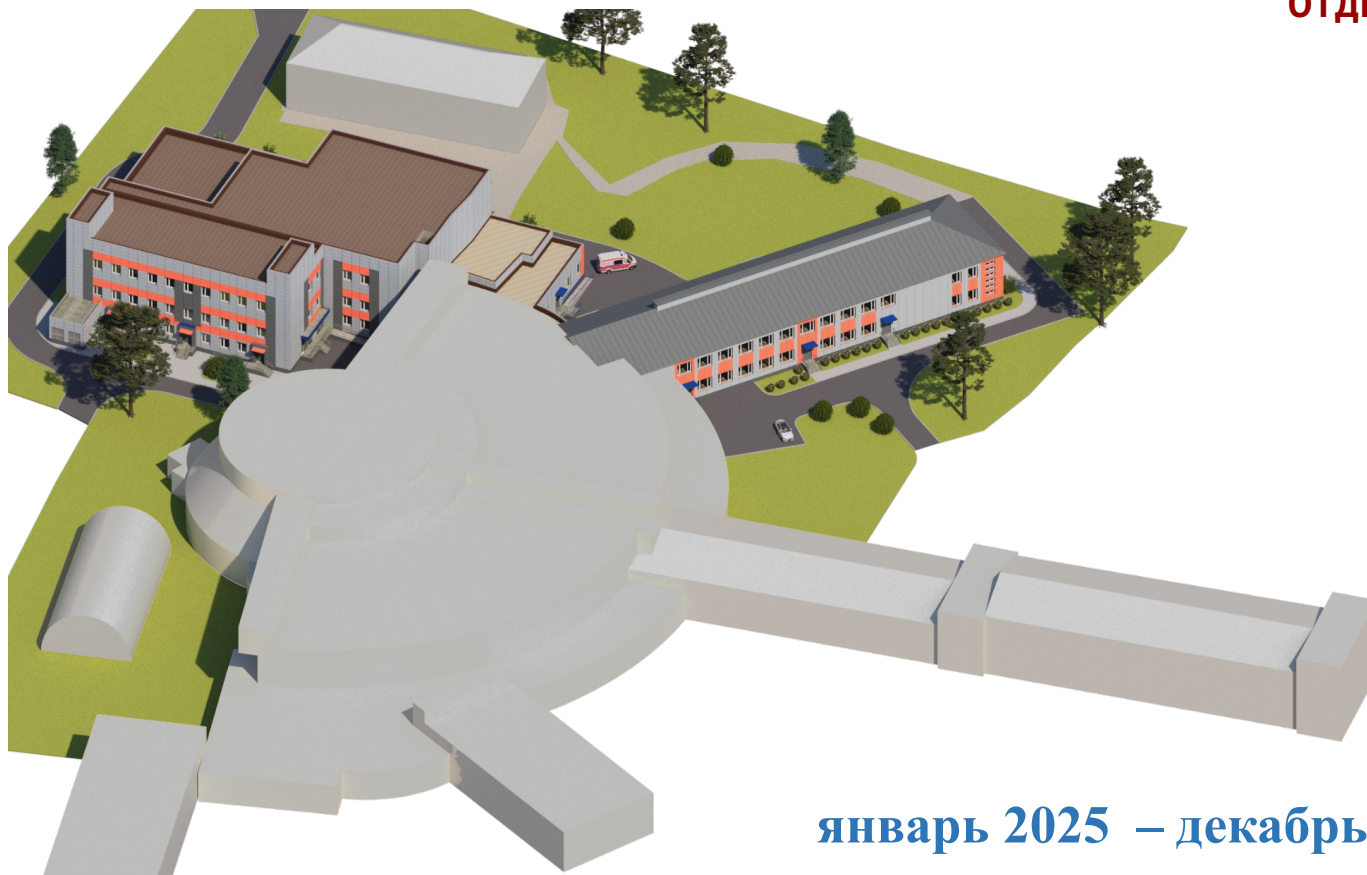


ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

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



**УСКОРИТЕЛЬНЫЙ
ОТДЕЛ**



январь 2025 – декабрь 2025



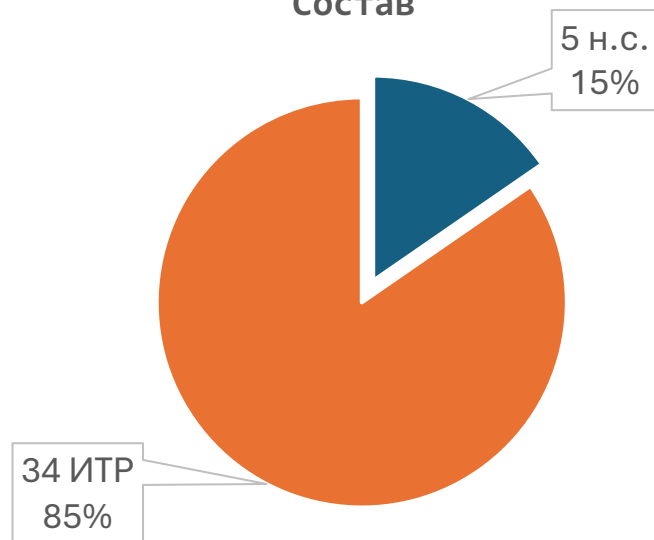
Кадровый состав УО ОНР

Всего **39 человек** (+4 совм.)

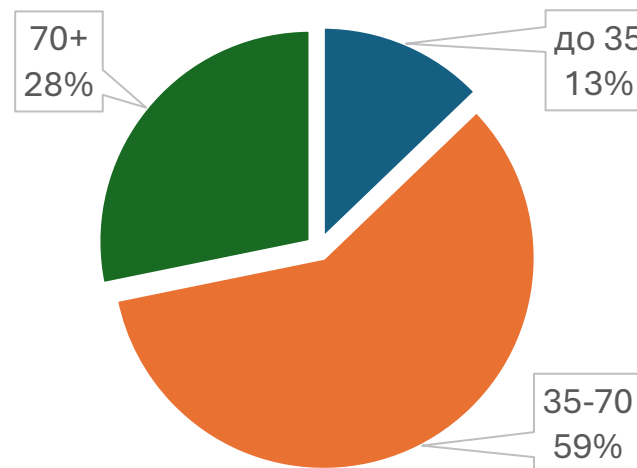
ЛФТУ – 5 (+1 совм.)

ЦЭУ – 34 (+3 совм.)

Состав



Возраст (средний ~59лет)





Научные результаты УО ОПР за 2025

Подразделение	Публикации	WoS/Scopus	РИДы
УО	3+5(тезисы)	1	0

Q3 – 1 шт.

В сборнике – 2 шт.

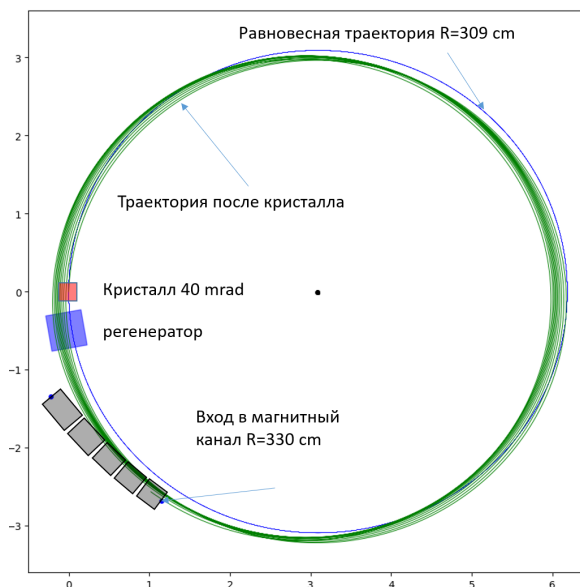
Участие УО ОПР в конференциях:

1 конференция (доклад)

Организация секции по ядерной медицине и физике ускорителей (16 лекций)
в рамках 57 Зимней Школы ПИЯФ

Совместные работы:

- Моделирование дополнительной системы вывода изогнутым кристаллом протонного пучка из СЦ-1000 (ЛКОЗЧ ОФВЭ);
- Проведение экспериментов на синхроциклотроне СЦ-1000 по измерению спектральных характеристик нейтронного излучения протон-нейтронного конвертера (ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»);
- SPD Straw Tracker test (ОФВЭ+ОИЯИ);
- Исследование характеристик пучков протонов, с использованием экспериментальной установки на основе телескопа пиксельных детекторов (СПбГУ).





Экспериментальный комплекс СЦ-1000

Ремонтные работы ноябрь 2024г. – апрель 2025г.

Поиск и устранение утечки воды в вакуумную камеру

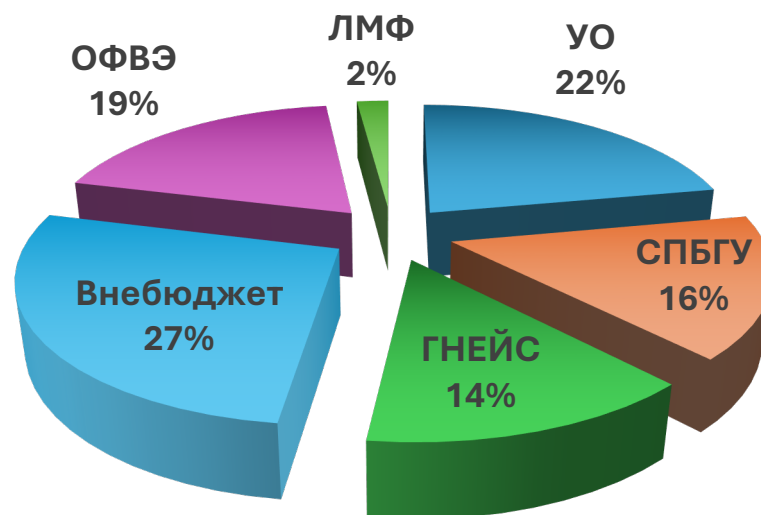
Ремонт системы прямой симметричной связи ВЧ-генератора с резонансной системой

Ремонтные работы июнь- сентябрь 2025г.

Демонтаж сгоревшего фидера прямой связи ВЧ-генератора с резонансной системой

Изготовление и монтаж новых фидеров

СЦ-1000: Распределение времени между научными программами в 2025 г (824 часа).



ДОГОВОРЫ ОПР в 2025 году				
Отдел	Заказчик	Сумма договоров в 2023 г.	Сумма договоров в 2024 г.	Сумма договоров в 2025 г.
УО	ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», АО "РНИИ "Электронстандарт", АО «РКС», ООО «НПЦ «Гранат», АО «НИИП», ОИЯИ, ООО «НПП Астроориентир». , АО «НИИ КП», ООО "ИРЗ ТЕСТ", ООО "НПП "Детектор".	4 377 600р.	11 836 800р.	10 137 600р.
	ИТОГО:	4 377 600р.	11 836 800р.	10 137 600р.

Выполнен ежегодный показатель «Количество уникальных организаций-пользователей научного оборудования центров коллективного пользования, уникальных научны установок и мегаустановок»

17 организаций пользователей ЦКП «Гатчинский Протонный Комплекс»



Работы по эксплуатации комплекса СЦ-1000

Наименование работ	Описание	Срок	Стоимость тыс. руб.
Текущие регламентные работы	Ремонт и техническое обслуживание насосного оборудования; Ремонт коллиматоров главного и экспериментального зала; Восстановление вакуума Работы по поиску максимума интенсивности выведенного пучка	01-03.2026	В рамках лимита субсидии на выполнение ГЗ
Необходимые затраты для сокращения частоты аварийных остановок (планы!)	Изготовление нового вариатора частоты Замена лампы ГУ-88А Течеискатель		31 500
	Расходы на содержание и эксплуатацию оборудования (вместо 2 500)	ежегодно	10 000
Мероприятия по устранению или компенсации дефицитов безопасности комплекса СЦ-1000 в рамках продления срока его эксплуатации	Обследование строительных конструкций здания №2, комплекса ИРИС и ангара ГНЕЙС Замена элементов системы радиационного контроля, исчерпавших свой ресурс Замена элементов системы вентиляции Замена элементов системы электроснабжения Дооснащение подвала экспериментального зала здания №2 установками автоматического пожаротушения	2025-2028	130 000
Программа модернизации Ускорительного комплекса	Модернизация систем Ремонтно-восстановительные работы зданий и помещений	5 лет	935 000

Затраты на эксплуатацию и мероприятия по продлению срока эксплуатации СЦ-1000 сверх лимита субсидий на выполнение госзадания за период 2021-2025 гг.

Мероприятия по программе продления срока эксплуатации комплекса синхроциклотрона	3 290 тыс.
Затраты на содержание и эксплуатацию оборудования	8 762 тыс.



Онкоофтальмологический комплекс «ОКО»

В рамках проекта «ОКО» поставлено нестандартизированное оборудование:

- система терапевтического пучка малой интенсивности;
- устройство пространственного позиционирования пациента;
- устройство формирования и контроля пучка (поставлено в 2025 году);
- программного аппаратный комплекс.

- ✓ Откорректирована проектная документация
- ✓ Получено положительно заключение ФАУ «Главгосэкспертиза России»
- ✓ Завершены строительно-монтажные работы
- ✓ Смонтировано всё нестандартизированное оборудование
- ✓ Получено заключение о соответствии
- ✓ Получено разрешение на ввод в эксплуатацию

Мероприятия, необходимые для осуществления медицинской деятельности:

Регистрация медицинского изделия – **декабрь 2027**;

Начало оказания медицинской помощи на объекте - **декабрь 2028**.





Радиоизотопный комплекс «ИЗОТОП»

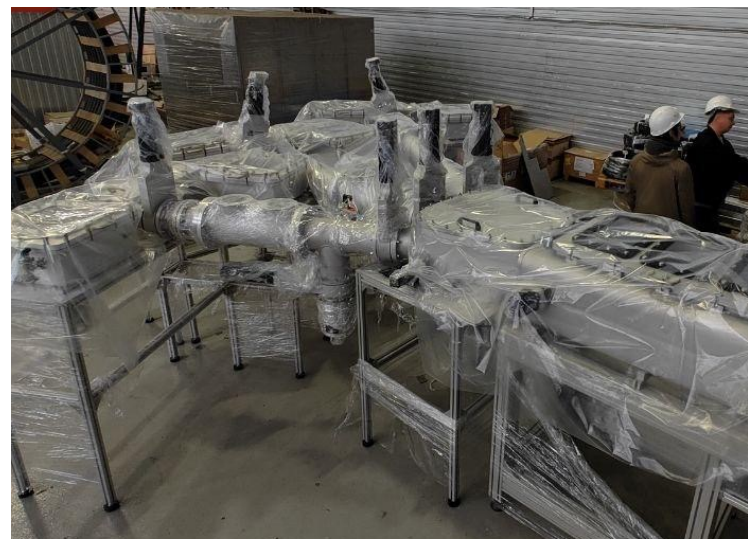
В рамках проекта «ИЗОТОП» поставлено нестандартизированное оборудование:

- Высокотемпературная мишенная станция;
- Мишенная станция для радиохимического выделения целевых радионуклидов;
- Комплект горячих камер;
- Система выделения целевых радиоизотопов;
- Масс-сепаратор.

- ✓ Откорректирована проектно-сметная документация (далее – ПСД)
- ✓ Изготовлено, поставлено и передано на ответственное хранение нестандартизированное оборудование
- ✓ Получено положительное заключение ФАУ «Главгосэкспертиза России»
- ✓ ППК «ВСК» законтрактованы первоочередных позиций длительного срока изготовления (материалы и оборудование). До конца 2025 года все первоочередные позиции будут законтрактованы



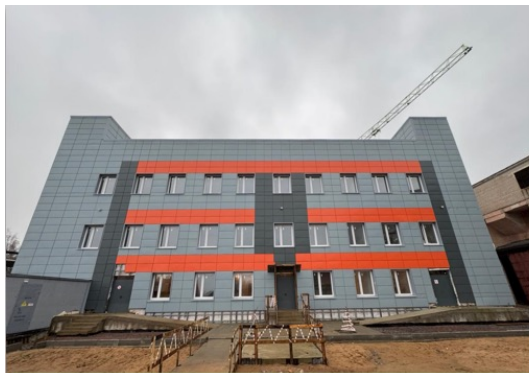
Срок ввода объекта в эксплуатацию – **декабрь 2026**;
Начало наработки радиоизотопов – **декабрь 2027**.



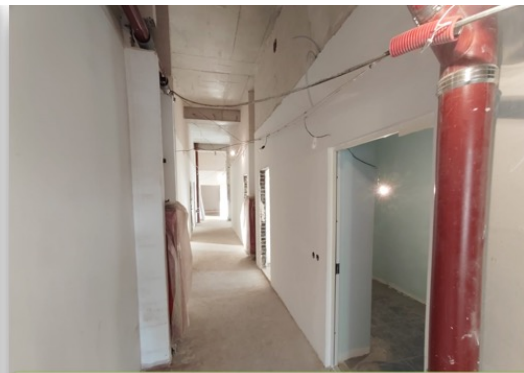


«ИЗОТОП»

Общий вид



ИЗОТОП – АБК – Общий вид



ИЗОТОП – АБК – Внутренние отделка



ИЗОТОП – АБК – Внутренние отделка



ИЗОТОП – АБК – Внутренние отделка

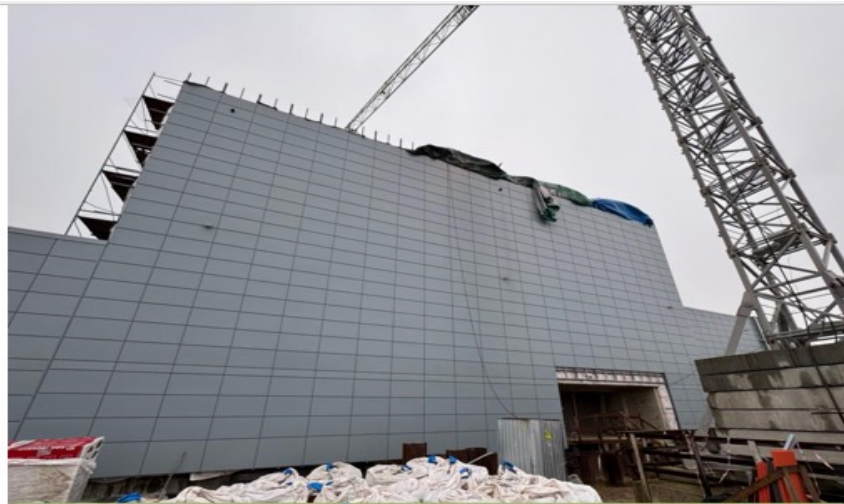
ИЗОТОП («АБК»)

Достигнутые результаты за 2025 год:

- Откорректирована проектно-сметная документация (далее – ПСД)
- Изготовлен, поставлен и передан на ответственное хранение масс-сепаратор
- В настоящее время ПСД находится на проверке в ФАУ «Главгосэкспертиза России», получение положительного заключения ожидается до конца 2025 года
- ППК «ВСК» законтрактованы 16 из 17 первоочередных позиций длительного срока изготовления (материалы и оборудование). До конца 2025 года все первоочередные позиции будут законтрактованы



ИЗОТОП – БЛОК Д – Общий вид



ИЗОТОП – БЛОК Д – Общий вид



ИЗОТОП – БЛОК Д – Общий вид



ИЗОТОП – БЛОК Д – Бункерные двери

ИЗОТОП (Блок «Д»)

Отдел прикладной ядерной физики (ОПЯФ) ОПр

Лаборатория радиационной физики (ЛРФ)

Основные направления исследований в 2025 г.

- Измерения массовых, энергетических и угловых распределений осколков, а также сечений деления актинидов нейтронами в диапазоне энергий 1-200 МэВ (нейтронный времяпролётный спектрометр ГНЕЙС на базе СЦ-1000, Гатчина);
- Работы по созданию установки FISCO – исследование множественности нейтронов и осколков деления (РК ПИК);
- Работы по адаптации стенда ИСНП/ГНЕЙС (исследование радиационной стойкости ЭКБ) под нужды пользователей и совершенствованию оборудования диагностики нейтронного пучка (нейтронный времяпролётный спектрометр ГНЕЙС на базе СЦ-1000, Гатчина).

ПУБЛИКАЦИИ

По результатам исследований в 2025 г. было **опубликовано 2 работы**, представлено 6 докладов на:

- 75-я международная конференция “Ядро-2025: Ядерная физика и физика элементарных частиц. Ядерно-физические технологии”, 1-6 Июля, 2025, г. Санкт-Петербург, Россия;
- Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2025), 29 сентября - 3 октября, 2025, г. Томск, Россия.

ДОСТИЖЕНИЯ

Первая премия в области ядерной физики низких энергий, конкурс научных работ НИЦ КИ – ПИЯФ в 2025 г. за Цикл работ “Экспериментальные и теоретические исследования процесса деления тяжёлых ядер нейтронами промежуточных энергий 1-500 МэВ”, авторы: А.С. Воробьев, А.М. Гагарский, О.А. Щербаков, Л.А. Вайшнене, А.М. Тягельская, Н.М. Ольхович, А.Л. Барабанов, Т.Е. Кузьмина.

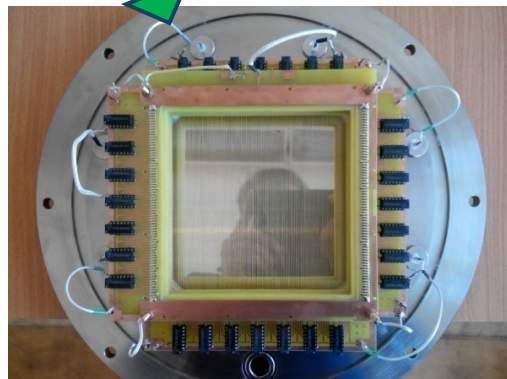
Изучение угловых распределений осколков и сечений деления тяжёлых ядер нейтронами в диапазоне энергий 1-200 МэВ

Экспериментальная установка

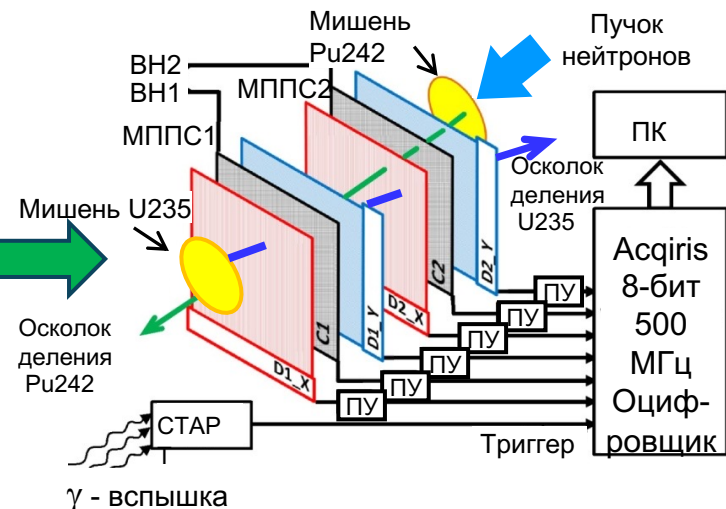
Размещение на пучке №5 спектрометра ГНЕЙС



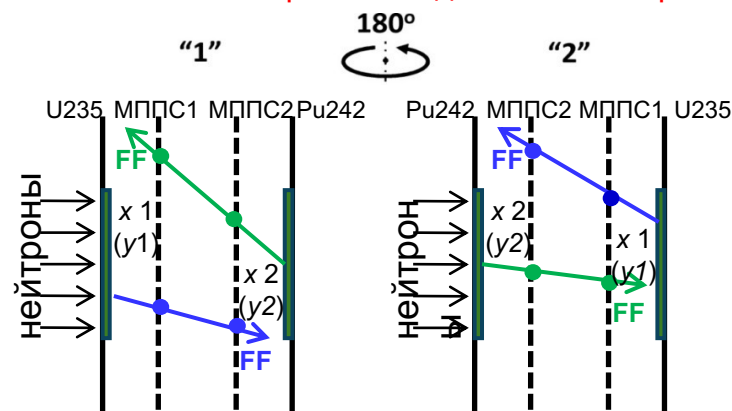
Позиционно-чувствительный детектор осколков на основе MWPC



Система накопления на основе оцифровщика



Измерения проводятся для двух ориентаций относительно направления движения нейтронов

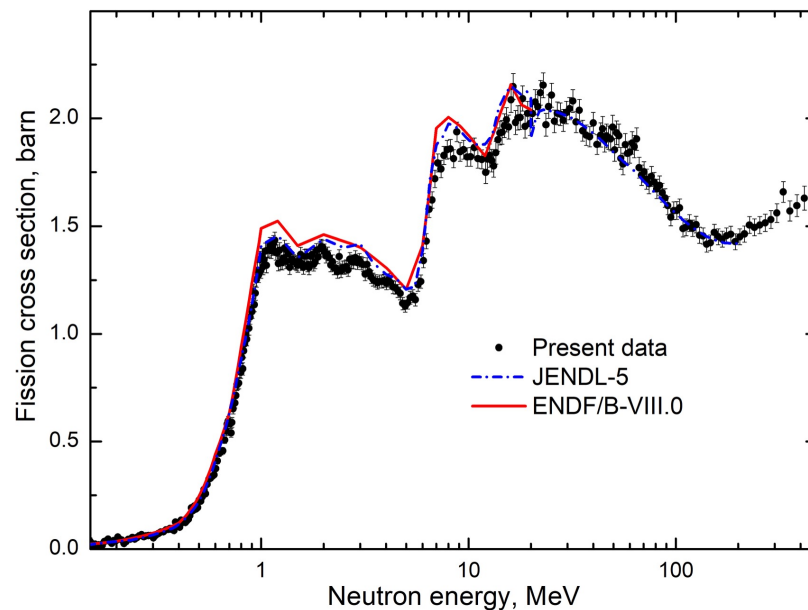
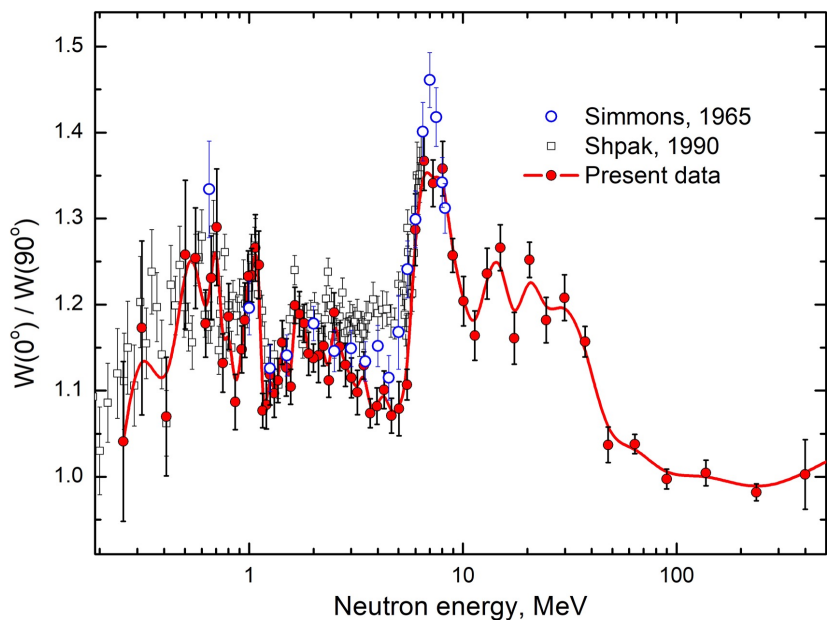


Изучение угловых распределений осколков и сечений деления тяжёлых ядер нейтронами в диапазоне энергий 1-200 МэВ

Результаты:

- экспериментальная установка модернизирована таким образом, что можно проводить **одновременные измерения сечений деления и угловых распределений осколков деления** – это позволяет повысить точность описания (расчётов) в рамках используемой нами модели Хаузера-Фешбаха: **для нейтронов промежуточных энергий такие расчёты выполняются впервые;**

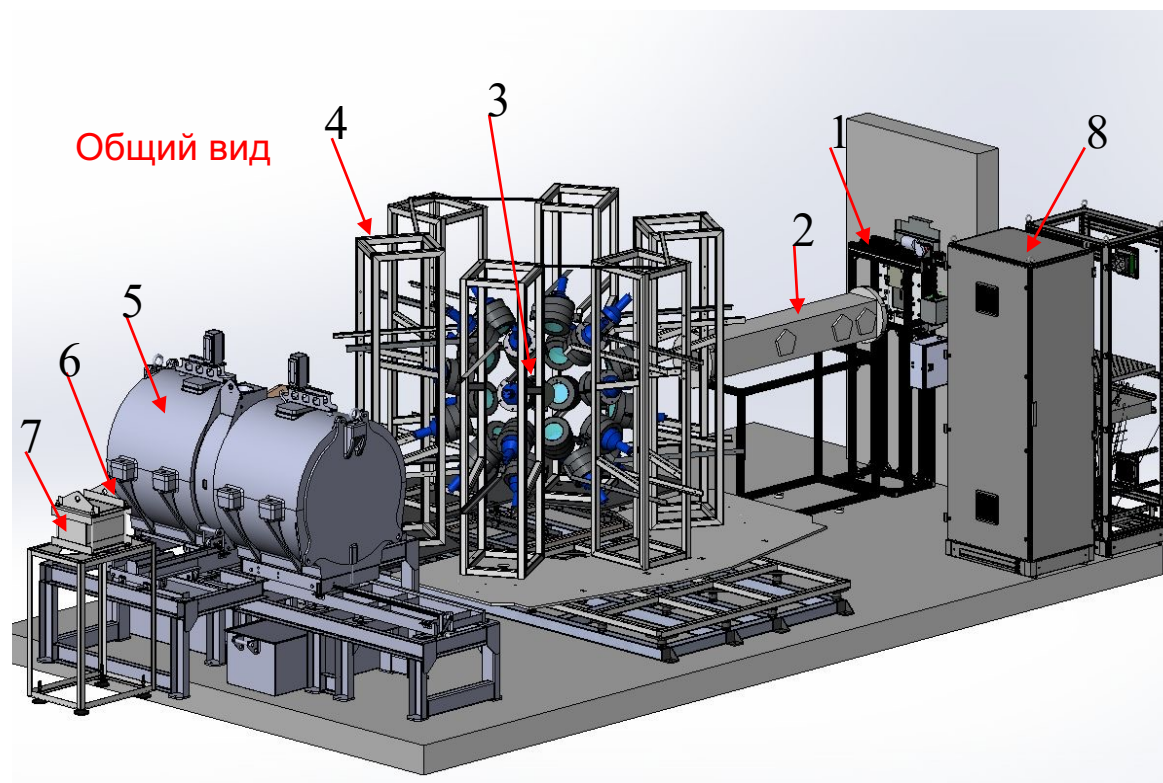
Измеренные сечения деления (справа) и анизотропия угловых распределений осколков деления $^{242}\text{Pu}(n,f)$ (слева) в сравнении с результатами других работ и оценкой из библиотеки ENDF/B-VIII.0



A.S. Vorobyev et al. JETP Letters 121, 497 (2025)

- ✓ Угловые распределения осколков деления $^{242}\text{Pu}(n,f)$ в области энергий нейтронов **выше 8 МэВ измерены впервые.**

Установка для исследования множественности нейтронов и осколков деления на пучке Н7-2 РК ПИК – FISCO (FISSion COrrelation)

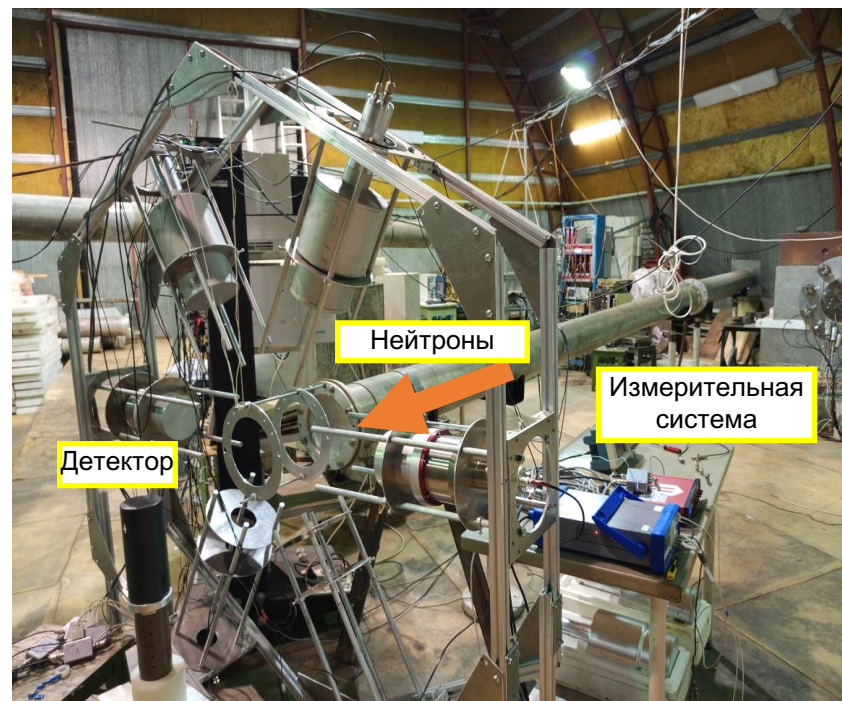
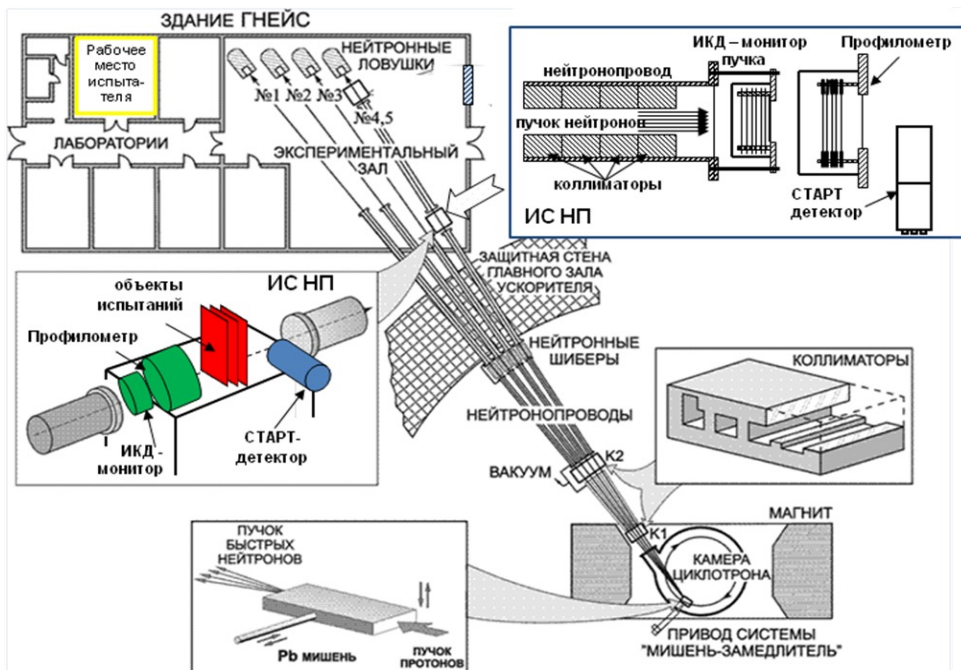


1. Локальный шибер нейтронного пучка
2. Нейтронпровод внешний
3. Детектор заряженных частиц деления
4. Многосекционный детектор нейтронов и γ - квантов деления
5. Детектор множественности нейтронов деления
6. Монитор нейтронного пучка
7. Ловушка нейтронного пучка
8. Система управления и сбора информации

В течение 2025 года были продолжены работы по созданию установки FISCO:

- на пучке №2 спектрометра ГНЕЙС произведена **выборочная проверка закупленных детекторных сборок на основе кристаллов NaI и LaBr₃** - полученные параметры сборок соответствуют ТЗ и сертификату;
- выполнена **доработка Многосекционного детектора нейтронов и γ -квантов деления**, а также **Детектора множественности нейтронов деления**;
- ведутся работы по подготовке эксплуатационной документации.

Испытательный стенд для исследования радиационной стойкости ЭКБ на нейтронах с атмосферным спектром (1-1000 МэВ)



- Продолжены работы по адаптации стенда **ИСНП/ГНЕИС** под нужды пользователей и совершенствованию **приборов контроля и диагностики пучков** быстрых нейтронов.
- Совместно с Ускорительным отделом НИЦ КИ – ПИЯФ и ФГУП “РФЯЦ-ВНИИТФ им. акад. Е.И. Забабахина” (г. Снежинск, Челябинская обл.) проведены **испытания электронного оборудования** на нейтронах с энергиями 1 - 500 МэВ.
- На пучке №5 спектрометра ГНЕИС выполнена совместная работа с Лабораторией нейтронной физики им. И.М. Франка (ОИЯИ, г. Дубна) по измерениям дифференциальных сечений упругого и неупругого **рассеяния быстрых нейтронов на углероде** в качестве демонстрации возможности использования установки ГНЕИС для такого типа экспериментов.

Отдел прикладной ядерной физики (ОПЯФ) ОПр

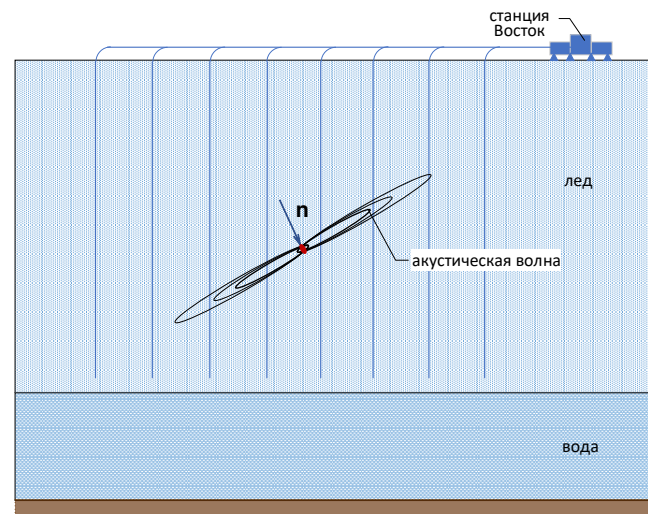
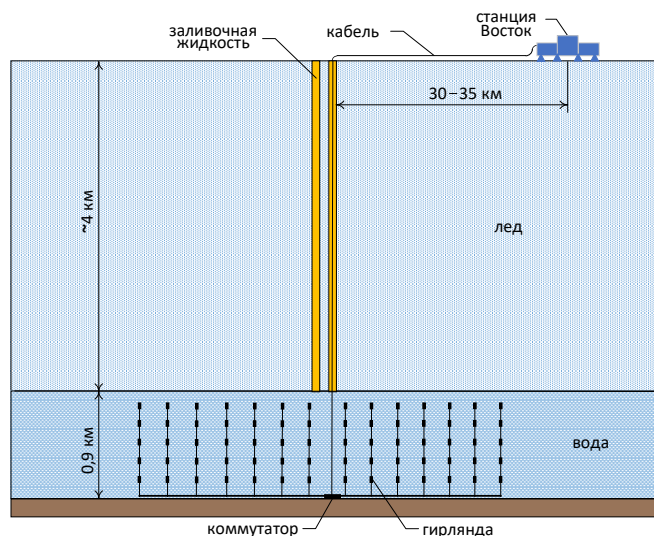
Лаборатория электронного и программного обеспечения (в.н.с. Захаров А.А.)

«Нейтринный детектор нового поколения в Антарктиде»

Завершена разработка концепции детекторов астрофизических нейтрино нового поколения с оптическим и акустическим методами регистрации событий в подледниковом озере Восток в Антарктиде.

В основу концепции положены три инновационных подхода:

- 1 – размещение детекторов в условиях экстремально низких фонов;
- 2 – использование современных оптических и акустических сенсоров;
- 3 – применение новой технологии скоростного бурения льда и экологически чистого проникновения в подледниковое озеро (патент РФ на изобретение № 2825375).



В 2026 году в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ планируется издание монографии: *«Нейтринные детекторы нового поколения для изучения астрофизических нейтрино и новые возможности для исследования подледниковых озер Антарктиды».*



Отдел наноструктурированных материалов, ОНСМ (зав. к. х. н. Взнуздаев М.Е., 24 сотр.)

- Лаборатория химии и спектроскопии углеродных материалов (ЛХСУМ, **11 сотр.**, зав. к. ф-м. н. Суясова М.В.)
- Группа технологии синтеза новых материалов (ГТСНМ, **6 сотр.**, рук. с. н. с. Седов В. П.)
- Группа радиационного модифицирования материалов (ГРММ, **5 сотр.**, рук. к. х. н., в. н. с. Лютова Ж.Б.)
- Группа композитных наноматериалов (ГКН, **2 сотр.**, рук. зав. к. ф-м. н., в. н. с. Борисенкова А.А.)

Сведения о публикациях за 2025 г:

Статьи	Q1	2
	Q2	1
	Q3	2
Тезисы на конференциях	Всероссийская	9
	С международным участием	5
	Международная	2



Основные направления работ ОНСМ в 2025 году

Основной объем работ, производимых ОНСМ в 2025 году, был связан с синтезом и исследованием разнообразных наноструктурированных материалов для биомедицинских приложений:

1. Изучение композитных наноматериалов на основе фуллеренов, получение водорастворимых конъюгатов с фуллеренами и витаминами для тераностики (совместно с **СПбГТИ ТУ, РИ** и др., Борисенкова А.А., Титова А.В., Орлова В.А. и др.)
2. Исследование радиопротекторных свойств фуллеренов (совместно с **СПбГТИ ТУ**, Лютова Ж.Б., Маркова М.А., Халеев В.С. и др.)
3. Исследование влияния электронно-лучевой обработки на физико-химические свойства волокон ПолиАкрилоНитрила (совместно с **СПбГТИ ТУ**, Лютова Ж.Б., Маркова М.А., Костерова О. и др.)
4. Радиационная модификация биodeградируемых полимеров для систем направленной костной регенерации (совместно с **СПбГТИ ТУ**, Лютова Ж.Б., Попугаев А.В., Маркова М.А. и др.)
5. Синтез и исследование сорбционных свойств нетканых волокнистых материалов на основе углеродного волокна, модифицированного фуллеренолами (совместно с **СПбГУПТД (СПбГУ промышленных технологий и дизайна)** и **ЛКЯ ОФВЭ**, Седов В.П., Взнуздаев М.Е., Рябоконь И.С., Ганжа В.А. и др.)
6. Антирадикальное действие фуллеренолов в сравнении с водорастворимыми природными антиоксидантами в системе перекисного окисления гемоглобина. (совместно с **ИНБИ им. Баха РАН (Москва)**, Топунов А.Ф., Седов В.П., Рябоконь И.С., Взнуздаев М.Е., Орлова Д.Н.).
7. Синтез карбоксилированных водорастворимых производных фуллеренов C_{60} и C_{70} по гранту «Комплексы и конъюгаты дендримеров с производными фуллеренов для биомедицинских и тераностических приложений: моделирование, синтез и эксперимент» (совместно с **СПбГУ**, Маркелов Д.А., Седов В.П., Рябоконь И.С. и др.)
8. Изучение возможности синтеза эндофуллеренов теллура и йода-131 для создания радиофармпрепаратов (совместно с **РИ**, Седов В.П., Рябоконь И.С., Орлова В.А., Взнуздаев М.Е., Орлова Д.Н.)

Синтез наноструктурированных форм углерода (фуллеренов, фуллеренолов, эндометаллофуллеренов фуллеренов для всех работ данного направления произведен силами группы технологии синтеза новых материалов (ГТСНМ), рук. с.н.с. В.П. Седов

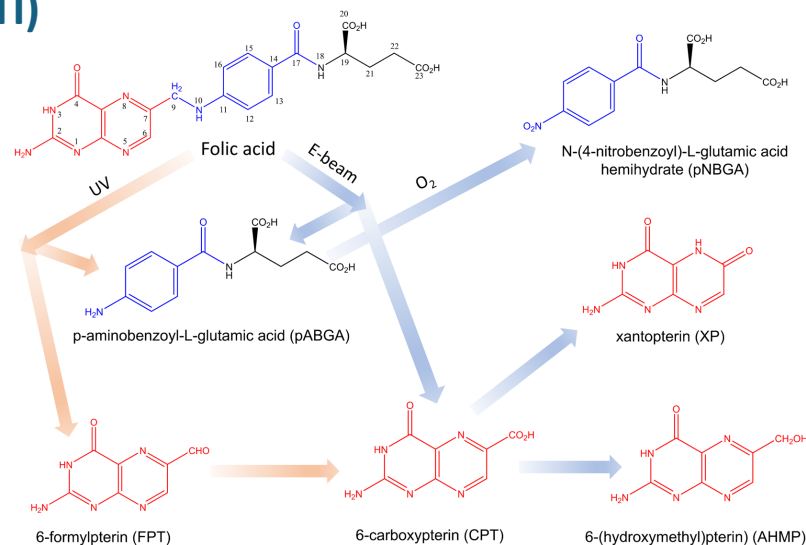


Исследование конъюгатов фолиевой кислоты с фуллереном и ПолиВинилПирролидоном (ПВП)

Фолиевая кислота (ФК) используется в качестве целевого лиганда для **адресной доставки лекарственных препаратов**, в том числе с р/а изотопами к опухолевым клеткам. Однако «чистая» ФК обладает **низкой фото- и радиостабильностью**.

Установлено, что фуллерен C_{60} в составе конъюгата с ФК подавляет ее деградацию как при фотолизе, так и при радиоллизе.

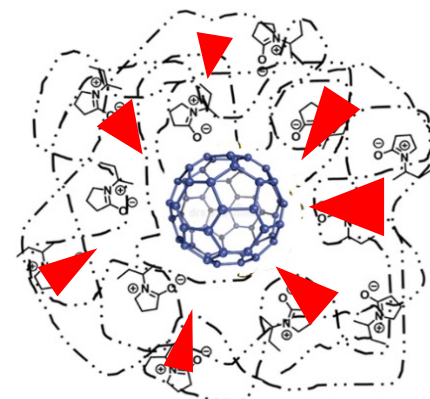
[A.A. Borisenkova et al. *Molecules* 30:2718 (2025) Q1]



На рисунке: механизмы деградации фолиевой кислоты при фотолизе (оранжевые стрелки) и радиоллизе (синие стрелки)

Радиационная стерилизация растворов лекарственных препаратов на основе полимеров **может изменять** характеристики, определяющие **эффективность адресной доставки лекарств**, такие как размеры частиц в растворе и их поверхностный потенциал. Изучено влияние облучения электронным пучком в дозах на гидродинамические свойства растворов конъюгата ФК-ПВП- C_{60} . Было показано, что средние размеры частиц конъюгата ФК-ПВП- C_{60} , и их дзета-потенциал не изменялись значительно при облучении электронным пучком в атмосфере инертного газа в диапазоне доз 3-8 кГр. Полученные результаты указывают на возможность проведения радиационной стерилизации растворов конъюгата ФК-ПВП- C_{60}

[A.V. Titova et al. *Polymers* 17:1259 (2025) Q1]

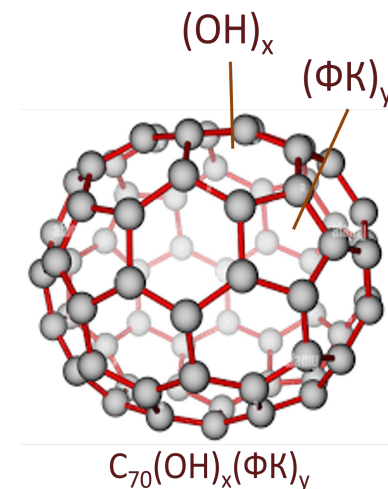
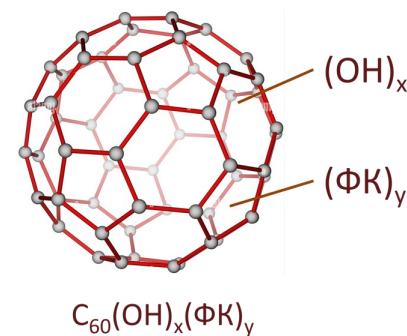


Конъюгат ФК-ПВП- C_{60}

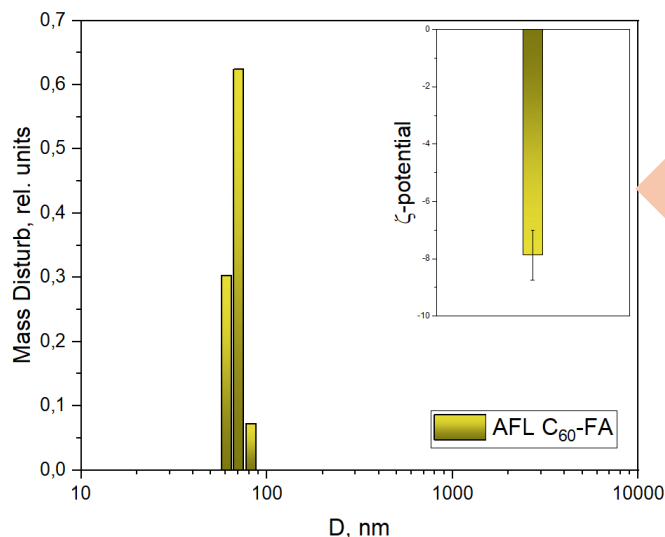


Исследование конъюгатов фолиевой кислоты с фуллереном

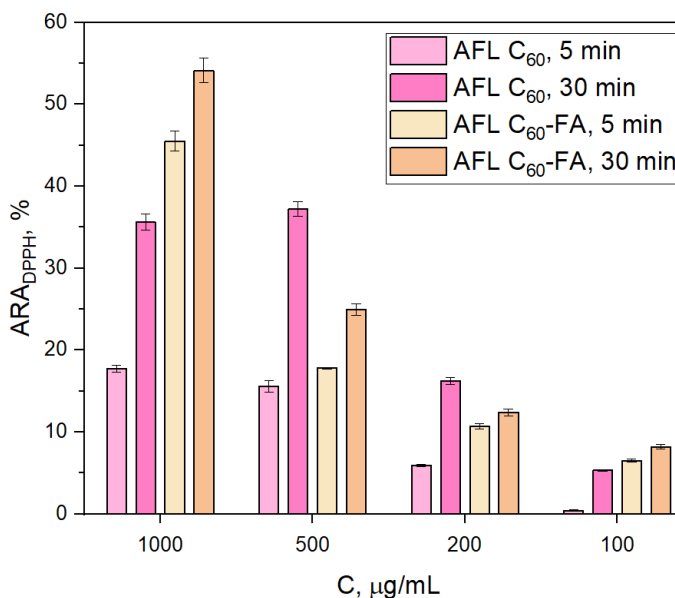
- Синтезированы комплексы фолиевой кислоты (ФК) ковалентно связанной с фуллереном на основе гидроксипроизводных фуллеренов C_{60} и C_{70}
- Эти соединения - прототипы новых конъюгатов ЭМФ ^{177}Lu с ФК
- Исследованы антирадикальные свойства полученных соединений, определена их предполагаемая структура.



Готовится
публикация



Размер частиц (до 200 нм)
полученных производных
благоприятен для
интернализации в клетки



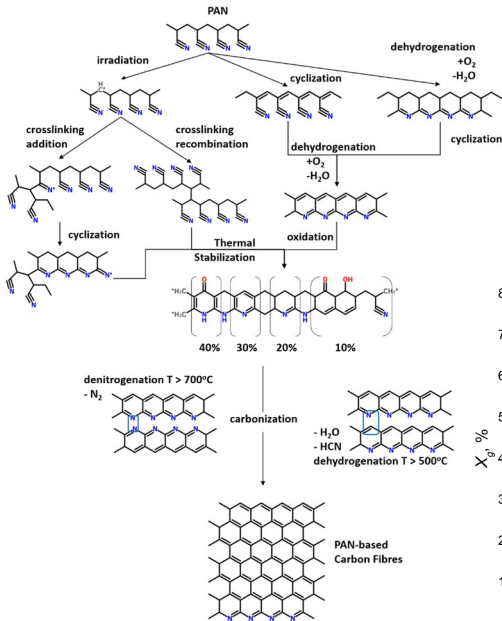
ФК в составе соединений
способствует повышению
антирадикальной активности
соединения как против
модельного радикала DPPH,
так и против активных форм
кислорода

Группа радиационного модифицирования материалов (рук. Лютова Ж.Б., в.н.с., к.х.н, доцент)



Исследование влияние электронно-лучевой обработки на физико-химические свойства волокон ПолиАкрилоНитрила

Полиакрилонитрил (ПАН)
прекурсор для производства **90%**
всех углеродных волокон (УВ)



ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Статическая
экстракция
ДМСО

Экстракция в
аппарате Сокслета
о-ксилол

**Объекты
исследования**

Полимерные композиции на основе акрилонитрила

Доза, кГр

До 1200

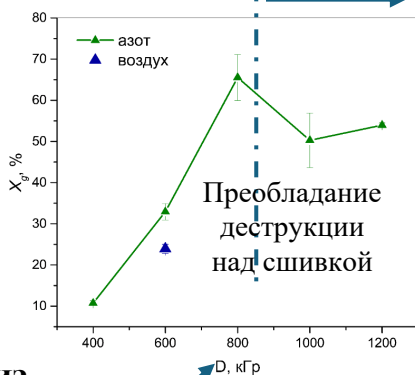
Атмосфера облучения

Воздух и инертный газ

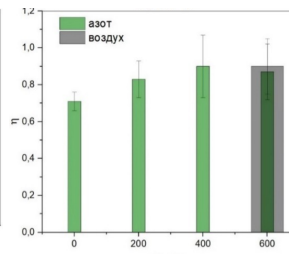
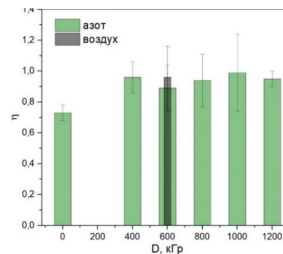
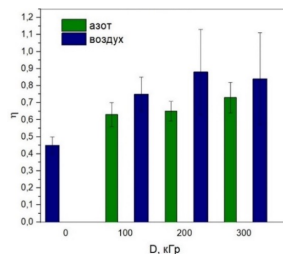
Методы исследования

ИК- и УФ- спектроскопия, рентгеновская дифракция, ЯМР, ТГА, ДТА, химический анализ, механические испытания

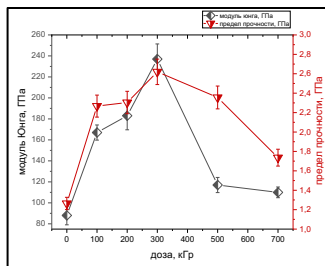
Содержание геле-фракции



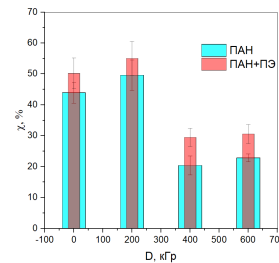
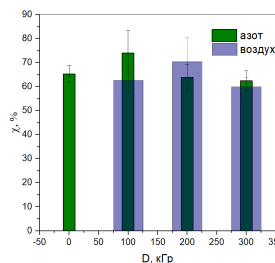
Степень циклизации (ИК-спектроскопия)



Механическая стойкость



Степень кристалличности (рентгеновская дифракция)

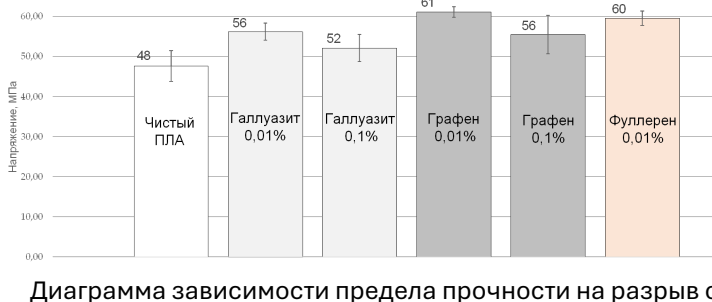


Показано, что **эффективность применения радиационной технологии** для производства углеродного волокна **зависит от подбора условий облучения, обеспечивающих максимальную сшивку и не допускающих преобладания процессов деструкции** полимерного волокна на основе полиакрилонитрила. Причем **подбор этих условий индивидуален для различных композиций ПАН (ПолиАкрилоНитрил) волокон.**

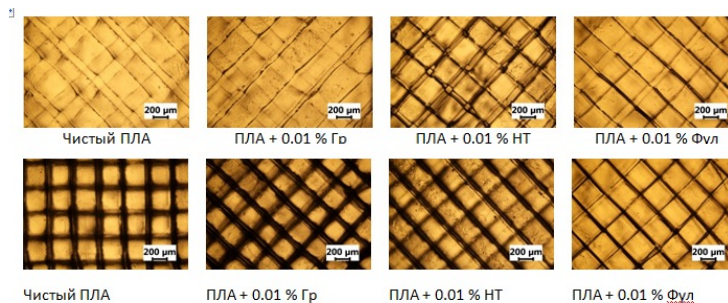
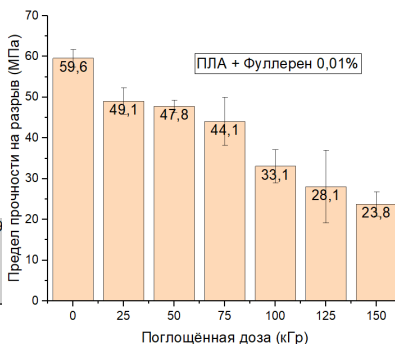
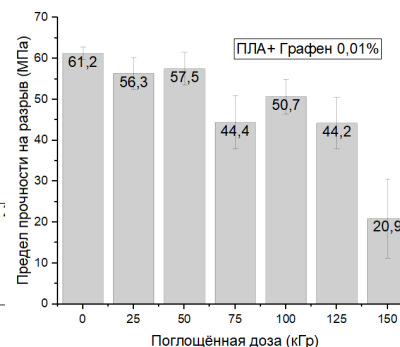
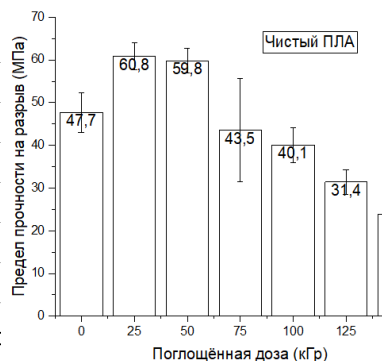


Радиационная модификация биodeградируемых полимеров для систем направленной костной регенерации

Предел прочности на разрыв

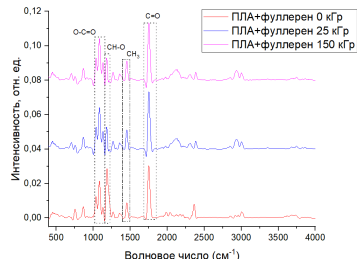
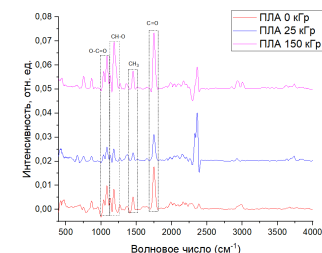


При облучении дозами до 150 кГр предел прочности на разрыв уменьшается примерно в 3 раза, минимальные полученные значения сопоставимы с прочностью замещающей костной ткани (7-20 МПа).



Ненаполненный ПЛА и нанокompозиты на его основе с концентрацией наполнителей 0.01 % в исходном состоянии

Ненаполненный ПЛА и нанокompозиты на его основе с концентрацией наполнителей 0.01 % после облучения дозой 150 Kp



Радиационное воздействие в пределах 150 кГр не приводит к деградации полимерных композитов на основе ПЛА

[Zernitckaia, E. A., Lozada, J. L., Yaremenko, A. I., Reutova, A. P., Markova, M. A.; Lyutova, Z. B. (2025). In Vitro Analysis of Biodegradation Properties and Sterilization Stability of PLA Membranes for Bone Regeneration. Journal of Maxillofacial and Oral Surgery, 1-14. (Q2)

Группа радиационного модифицирования материалов (рук. Лютова Ж.Б., в. н. с., к. х. н, доцент)

Разработка радиационной технологии производства биосовместимых полимеров с антиоксидантными присадками



1-й этап: получение филамента

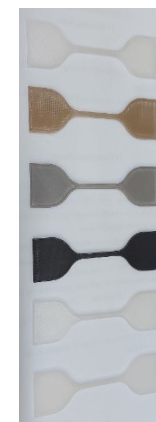


Экструзионная линия



Филамент ПЛА

2-й этап: подготовка образцов



Чистый ПЛА

ПЛА + C60

ПЛА + графен
(0,01%)

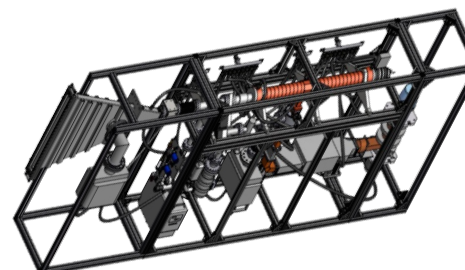
ПЛА + графен
(0,1%)

ПЛА + галлуазит
(0,01%)

ПЛА + галлуазит
(0,1%)

Напечатанные образцы

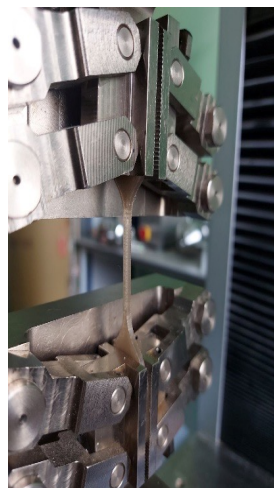
3-й этап: электронно-лучевая обработка



Линейный ускоритель электронов

Поглощённые
дозы:
25, 50, 75, 100,
125 и 150 кГр

4-й этап: испытания



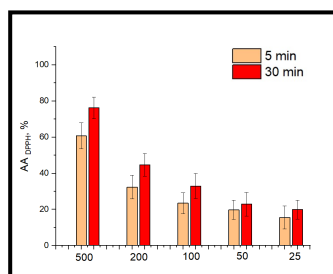
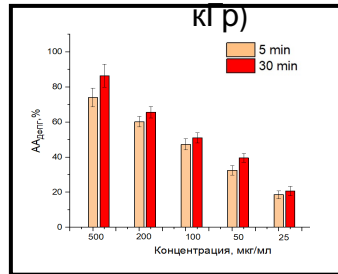
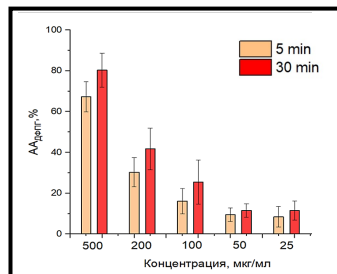
Материал
медицинского
назначения
с заданными
свойствами

Группа радиационного модифицирования материалов (рук. Лютова Ж.Б., в. н. с., к. х. н, доцент)

Радиационно-индуцированные процессы и их влияние на анти- и про- оксидантную активность растворов фуллеренолов

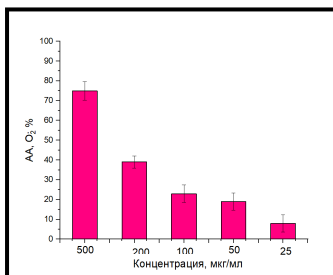
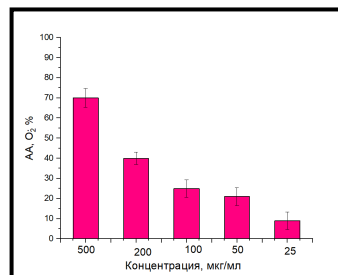
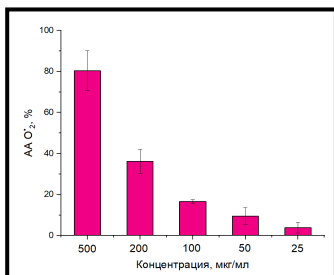
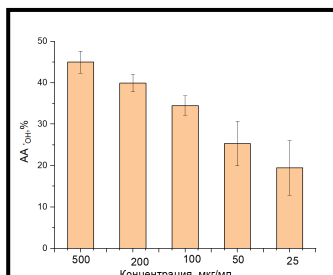
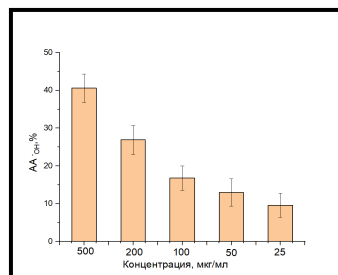
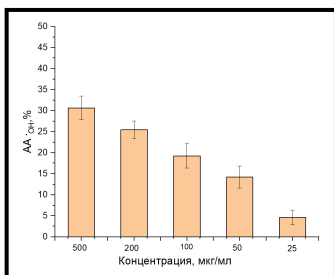
Антирадикальная активность фуллеренолов по отношению к модельному
свободному радикалу ДФПГ

Необлученные – облученные в р-ре (25 кГр) – облученные кристаллы (25

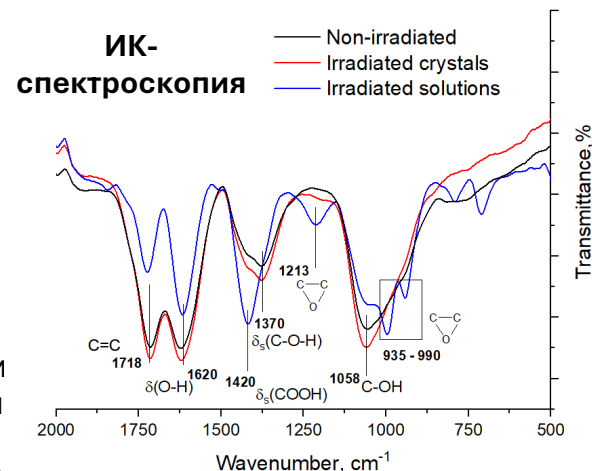


Антирадикальная активность фуллеренолов по отношению к физиологически
значимым свободным радикалам: гидроксильные радикалы (А) и синглетный
кислород (В).

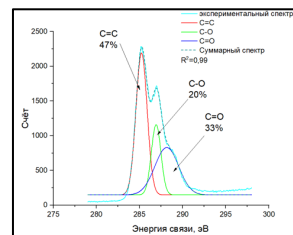
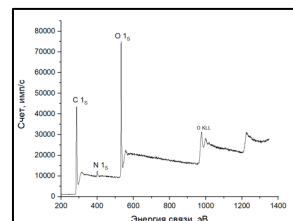
Необлученные – облученные в р-ре (25 кГр) – облученные кристаллы (25 кГр)



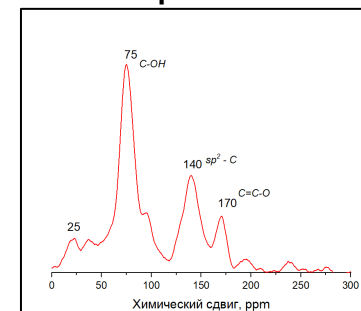
Радиационная стойкость



РФЭС- спектроскопия



ЯМР- спектроскопия



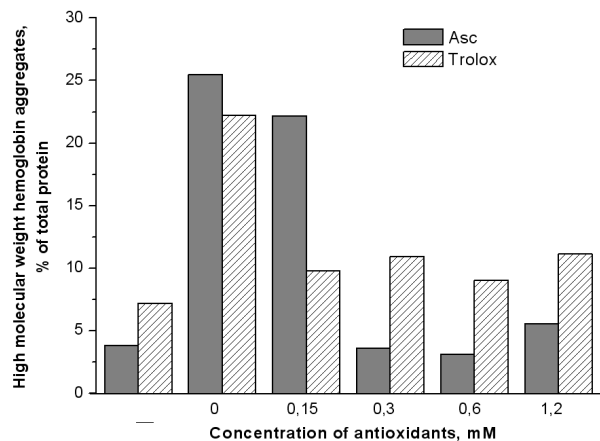
Готовится
публикация



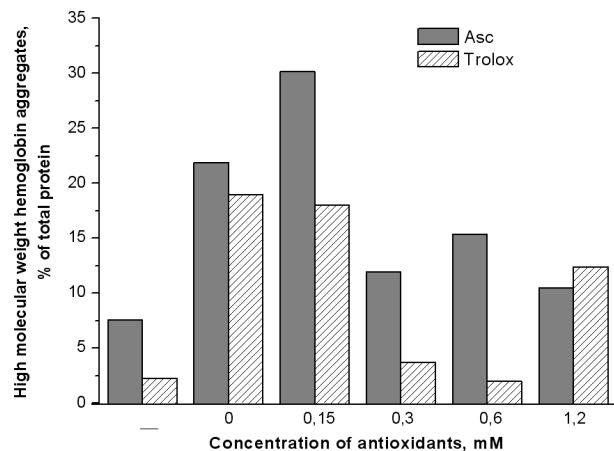


Влияние водорастворимых антиоксидантов и фуллеренолов на образование высокомолекулярных агрегатов гемоглобина в реакции с гидропероксидом *трет*-бутила (совместно с лабораторией биохимии азотфиксации и метаболизма азота ИНБИ РАН, зав. д.б.н. А.Ф. Топунов)

Окисленный гемоглобин

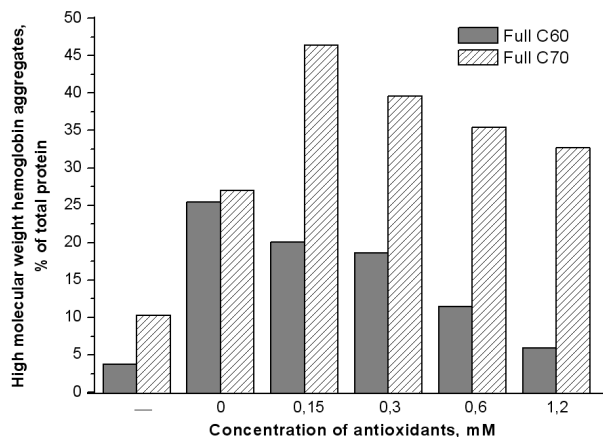


Оксигенированный гемоглобин

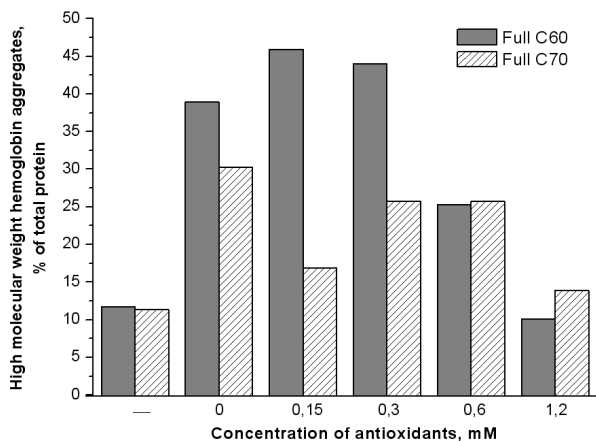


Показано, что фуллеренолы при высоких концентрациях могут служить альтернативой классическим водорастворимым антиоксидантам аскорбату и тролоксу

Окисленный гемоглобин



Оксигенированный гемоглобин



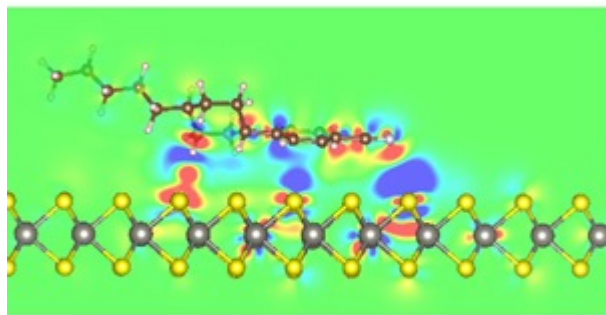
Готовится публикация



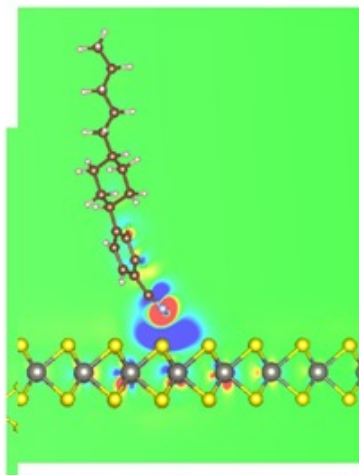
Отдел оптических и информационных технологий, ООИТ

Группа Н.В. Каманиной

Важнейшие результаты научной деятельности получены в области дальнейшей модернизации способа управления жидкокристаллических (**ЖК, LC**)-элементов, *с учетом приложения питания в форме синусоидальных, прямоугольных, трапецеидальных импульсов питания, а также светового управления.*



The calculated view of the WS₂ sensitized LC in planar configuration



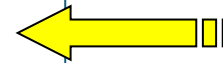
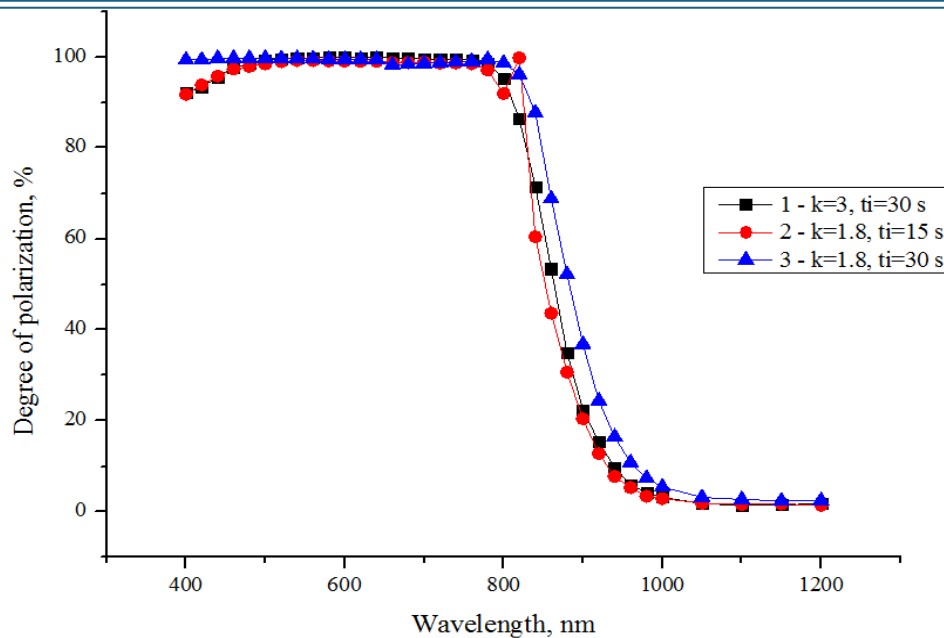
The calculated view of the WS₂ sensitized LC in homeotropic configuration

Для системы ЖК (класс 4-Циано-4'-пентилбифенил (**5CB**) + **наночастицы разного вида** изучены временные параметры (время реакции и релаксации электрооптического отклика на уровне 1-3 мс), что **существенно лучше аналогичных значений, получаемых для нематических ЖК-композиций в фирмах Samsung and LG**. Логичное объяснение увеличения быстродействия связано не только с увеличенной поляризацией комплексной системы, но и с энергетически выгодной укладкой вытянутых наночастиц, к примеру, WS₂ (MoS₂), по отношению в цианобифениловой молекуле ЖК. **На рисунках слева** показана возможная укладка неуглеродных нанотрубок в планарном и гомеотропном состоянии и взаимодействие между CN-группой ЖК и атомами нанотрубки.

Результаты были обсуждены (устное выступление Я.В.Барнаша) на XIII Международной научной конференции «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения» в период с 15 по 19 сентября 2025 г. (г. Иваново, ИХР РАН). Тема доклада «Преимущества процесса наноструктурирования материалов для расширения спектральной области функционирования, прозрачности и микротвердости». Авторы: Я.В.Барнаш, Н.В.Каманина

Важнейшие результаты научной деятельности получены в области поляризационной оптики при изучении дихроизма пропускания тонкопленочных поляризаторов лазерного излучения на основе ПолиВинил-Спиртовой (ПВС-PVA) композиции при структурировании данной матрицы разного рода наночастицами.

Поскольку ранее было установлено, что, *в противовес ожидаемым результатам*, при сенсбилизации ПВС *не углеродными* наночастицами (на примере наночастиц кварца SiO_2) **нет увеличения микротвердости** при сохранении приемлемых спектральных характеристик, то **было продолжено изучение свойств ПВС при сенсбилизации природным материалом шунгитом**, содержащим как углеродные, так и неуглеродные компоненты. На Рис. ниже представлен график степени поляризации от длины волны, что сравнимо с данными для объемных призм Глана ти Николя.



Степень поляризации образцов ПВС-пленок с добавлением 0.1 вес.% частиц шунгита при изменении времени иодирования (t_i) и степени растяжения (k).

Результаты дискутировались (устный доклад Л.О. Федоровой) на научной конференции «Материаловедение и нанотехнологии» («Materials Science and Nanotechnology» MSN-2025, 24-27 августа 2025 в г. Екатеринбурге. Тема доклада: «Shungite as a strengthening component of the thin polarizing polymer films». Авторы: Л.О. Федорова, П.В. Кужаков, Н.В. Каманина

ООИТ: группа проф. Н.В. Каманиной (отчет за 2025 г. по публикациям)

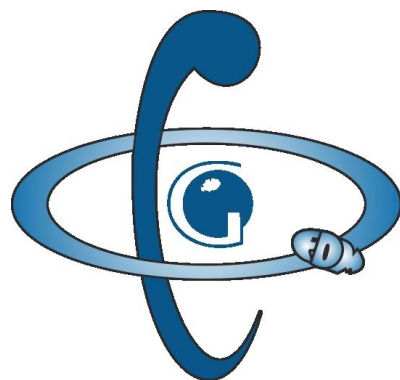
1. А.С.Тойка, Ю.А.Зубцова, Н.В.Каманина. «Перспективы использования перовскитов CsPbBr₃ в качестве фоточувствительных слоев в нематических жидкокристаллических устройствах». *Жидкие кристаллы и их практическое использование*, **2025**. Т. 25, № 1. С. 42–51. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.1.42. **Q4. WoS and Scopus** Liquid Crystals and their Application. **2025**. Vol. 25, № 1. P. 42–51. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.1.42
Журнал приравнен к категории K1 перечня ВАК. Ур.2 по Белому списку журналов.
http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/articles/273580article_2025_25_1_42-51.pdf
2. С. В. Лихоманова, Н. В. Каманина. «Механизмы взаимодействия молекул поливинилового спирта и углеродных наночастиц в водных растворах». *Прикладная физика* (Applied Physics), **2025**, No1, стр.78-83. DOI: 10.51368/1996-0948-2025-1-78-83. **Ур.2 по Белому списку журналов. Журнал приравнен к категории K2 перечня ВАК**
https://applphys.orion-ir.ru/appl-25/25-1/PF-25-1-078_RU.pdf
3. Yaroslav Barnash, Sonja Jovanović, Zoran Jovanović, Natalia Kamanina. “Electrical Features of Liquid Crystal Composition Doped with Cobalt Ferrite: Possible Sensing Applications”. *Inorganics*, **2025**, 13(4), 107; 9 pages. **Q2. WoS and Scopus. Ур.2 по Белому списку журналов.** <https://doi.org/10.3390/inorganics13040107>.
4. А.А. Тягунов, Я.В. Барнаш, Н.В. Каманина. «Электрические характеристики жидкокристаллической ячейки 5CB с добавлением наночастиц феррита кобальта (CoFe₂O₄)». *Письма в ЖТФ*, 2025, Том 51, Вып. 10, С.30-32. **Q3. DOI: 10.61011/PJTF.2025.10.60329.20195. Ур.2 по Белому списку журналов**
5. Н.В. Каманина, «Nanostructuration process influence on the basic properties of the organic and inorganic materials» (Учебное пособие, англо-язычное)», Санкт-Петербург, Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2025, 73 с.
6. М. Е. Ильин, А. С. Тойка, Н. В. Каманина. “Вариация свободных поверхностных энергий пленок термически восстановленного оксида графена, полученных на подложках оксида индия и олова”, *Прикладная физика*, **2025**, № 3, стр.67-72. DOI: 10.51368/1996-0948-2025-3-67-72. **Ур.2 по Белому списку журналов. Журнал приравнен к категории K2 перечня ВАК**
7. Барнаш Я.В., Каманина Н.В. «Модификация поверхности ZnS углеродными наноструктурами для задач оптоэлектроники». *Оптический журнал*. 2025. Т. 92. № 10. С. 89–95. **Q3. Ур.2 по Белому списку журналов. Журнал приравнен к категории K1 перечня ВАК.** <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2025-92-10-89-95>.
8. Каманина Н. В., Лихоманова С. В., Федорова Л. О., Корягин С. А., Ильин М. Е., Горбунов А. А., Тойка А. С., Барнаш Я. В., Тягунов А. А., Кужаков П. В. «Тонкие пленки поливинилового спирта, структурированные оксидом графена, для ориентирования жидкокристаллических молекул: угол смачивания, преимущество углеродной сенсibilизации и квантово-химическое моделирование». *Жидк. крист. и их практич. использ.* **2025**. Т. 25, № 3. С. 46–55. **Q4. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.3.46. Ур.2 по Белому списку журналов. Журнал приравнен к категории K1 перечня ВАК**
9. Лихоманова С.В., Каманина Н.В. Поляризационные свойства модифицированных йоднополивиниловых поляризаторов // *Оптический журнал*. **2025**. Т. 92. № 10. С. 82–88. **Q3** <http://doi.org/10.17586/10235086202592108288>
Ур.2 по Белому списку журналов. Журнал приравнен к категории K1 перечня ВАК



Отдел квантовой физики и химии (ОКФХ)

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

Лидеры групп и направлений исследований в ОКФХ:



PNPI

QPCD

Lab

О.Ю. Андреев (проф.СПбГУ /рук.гр., дфмн)

А.В. Зайцевский (гнс МГУ /рук.гр., дфмн)

Д.В. Карловец (доц.ИТМО, рук.гр., дфмн)

Н.С. Мосягин (зам.завлаб, внс, кфмн)

А.Н. Петров (завлаб/проф.СПбГУ, дфмн +кхн)

С.Г. Семенов (внс, кхн)

Л.В. Скрипников (снс/доц.СПбГУ, кфмн)

Д.А. Соловьев (внс СПбГУ/внс, дфмн)

А.В. Титов (и.о.зав.отделом, дфмн)

В.М. Шабаев (зав.каф.СПбГУ/внс, дфмн)



Построение новых вариантов (гатчинских / обобщенных) псевдопотенциалов (Мосягин Н.С.)



Отдел Квантовой Физики и Химии (ОКФХ)

О нас Новости Структура ОКФХ Гранты Публикации Приглашенные и устные доклады Недавние постеры Дополнение login

Our databases and computer codes

- пакет программ EXP-T
- Гатчинские псевдопотенциалы и базисы
- Библиотека LIBGRPP

Гатчинские псевдопотенциалы, (псевдо)атомные базисы & LIBGRPP code

Группа #	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Период																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
8	119	120	***															
* Лантаниды			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
** Актиноиды			89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	
***			121	122	123													

Построенные ОРПП применены, в частности, в работах 2025 г.:

- M.Athanasakis-Kaklamanakis, ..., **L.Skripnikov**, ..., **N.S.Mosyagin**, ..., **Nature** 648, 562 (2025)
(для расчета спектроскопических свойств для молекулы AcF);
- **P.A.Khadeeva**, **V.M.Shakhova**, **Y.V.Lomachuk**, **N.S.Mosyagin**, **A.V.Titov**, **Molecular Physics**, e2483881 (2025)
(для расчета химсдвигов линий РЭС в галогенидах иттербия);
- **D.Maltsev**, **Y.Lomachuk**, **V.Shakhova**, **N.Mosyagin**, **D.Kozina**, **A.Titov**, **Scientific Reports** 15, 10645 (2025)
(для изучения дефектов в кристаллах CaNb_2O_6 и YNbTiO_6 с примесными актиноидами U, Np, Pu, Am, Cm).



Article

Laser spectroscopy and CP-violation sensitivity of actinium monofluoride

562 | Nature | Vol 648 | 18/25 December 2025

<https://doi.org/10.1038/s41586-025-09814-1>

Received: 7 July 2025

Accepted: 27 October 2025

Published online: 17 December 2025

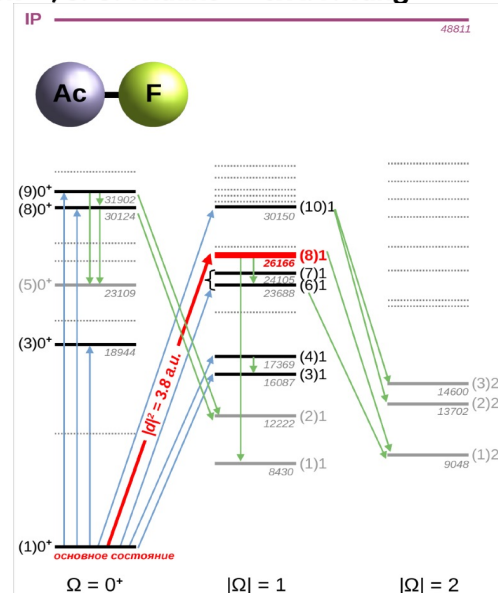
Open access

M. Athanasakis-Kaklamanakis^{1,2,3}✉, M. Au^{4,5}✉, A. Kyuberis⁶, C. Zülch⁷, K. Gaul^{7,8,9,10}, H. Wibowo¹¹, L. Skripnikov¹², L. Lalanne^{1,2}, J. R. Reilly^{4,13}, Á. Koszorús^{1,2}, S. Bara², J. Ballof^{5,9}, R. Berger^{1,7}, C. Berner⁴, A. Borschevsky⁶, A. A. Breier^{14,15}, K. Chrysalidis⁴, T. E. Cocolios², R. P. de Groote², A. Dorne², J. Dobaczewski¹¹, C. M. Fajardo Zambrano², K. T. Flanagan¹³, S. Franchoo^{16,17}, J. D. Johnson², R. F. Garcia Ruiz^{18,19}, D. Hanstorp²⁰, S. Kujanpää²¹, Y. C. Liu²², K. M. Lynch¹³, A. McGlone¹³, N. S. Mosyagin¹², G. Neyens²✉, M. Nichols²⁰, L. Nies¹, F. Pastrana¹⁸, S. Rothe⁴, W. Ryssens^{23,24}, B. van den Borne², J. Wessolek^{4,13}, S. G. Wilkins^{18,19} & X. F. Yang²²

✓ Теоретическое рассмотрение спектроскопических свойств молекулы AcF до начала эксперимента оказалось ключевым для подготовки эксперимента – выбора электронного перехода.

✓ После измерения теоретические данные были использованы и для отнесения линий.

Молекула AcF является перспективным кандидатом для измерения CP-нечётного шиффовского момента ядра





Article

Laser spectroscopy and CP-violation sensitivity of actinium monofluoride

562 | Nature | Vol 648 | 18/25 December 2025

<https://doi.org/10.1038/s41586-025-09814-1>

Received: 7 July 2025

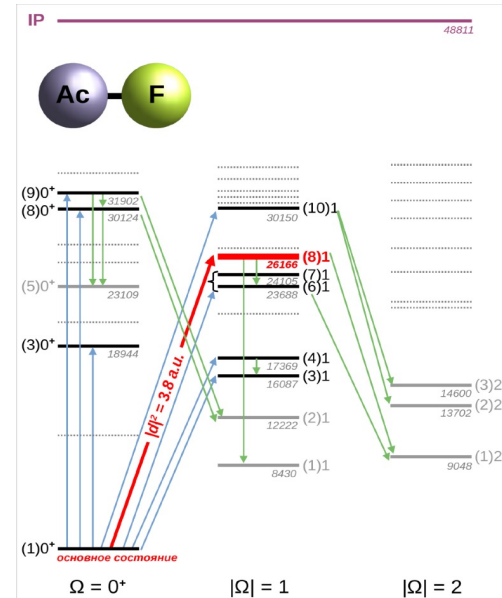
Accepted: 27 October 2025

Published online: 17 December 2025

Open access

M. Athanasakis-Kaklamanakis^{1,2,3}✉, M. Au^{4,5}✉, A. Kyuberis⁶, C. Zülch⁷, K. Gaul^{7,8,9,10}, H. Wibowo¹¹, L. Skripnikov¹², L. Lalanne^{1,2}, J. R. Reilly^{4,13}, Á. Koszorús^{1,2}, S. Bara², J. Ballof^{5,9}, R. Berger^{1,7}, C. Berner⁴, A. Borschevsky⁶, A. A. Breier^{14,15}, K. Chrysalidis⁴, T. E. Cocolios², R. P. de Groote², A. Dorne², J. Dobaczewski¹¹, C. M. Fajardo Zambrano², K. T. Flanagan¹³, S. Franchoo^{16,17}, J. D. Johnson², R. F. Garcia Ruiz^{18,19}, D. Hanstorp²⁰, S. Kujanpää²¹, Y. C. Liu²², K. M. Lynch¹³, A. McGlone¹³, N. S. Mosyagin¹², G. Neyens²✉, M. Nichols²⁰, L. Nies¹, F. Pastrana¹⁸, S. Rothe⁴, W. Ryssens^{23,24}, B. van den Borne², J. Wessolek^{4,13}, S. G. Wilkins^{18,19} & X. F. Yang²²

Author contributions M.A.-K., M.A., A.K., C.Z., K.G., H.W. and G.N. led the paper preparation. M.A.-K., M.A., A.K., C.Z., K.G., L.L., J.R.R., Á.K., S.B., J.B., R.B., C.B., A.A.B., K.C., T.E.C., R.P.d.G., A.D., K.T.F., S.F., J.D.J., R.F.G.R., D.H., S.K., Y.C.L., K.M.L., A.M., G.N., M.N., L.N., F.P., S.R., B.v.d.B., J.W., S.G.W. and X.F.Y. performed the experiment. A.K. and A.B. performed the relativistic coupled cluster calculations and reviewed the results. C.Z., K.G. and R.B. performed the 2c-ZORA-cGFH calculations and the global analysis and reviewed the results. L.S. performed the electronic-structure calculations of molecular terms and Franck–Condon factors and reviewed the results, and N.S.M. constructed the pseudopotentials for these electronic-structure calculations and reviewed the results. H.W. and J.D. performed the nuclear DFT calculations, and H.W., J.D. and W.R. reviewed the results. M.A.-K. and A.A.B. performed the data analysis. All co-authors participated in editing and revising the paper.



Группа физики ядра и элементарных частиц в молекулах. (рук. Скрипников Л.В.)

RESEARCH ARTICLES

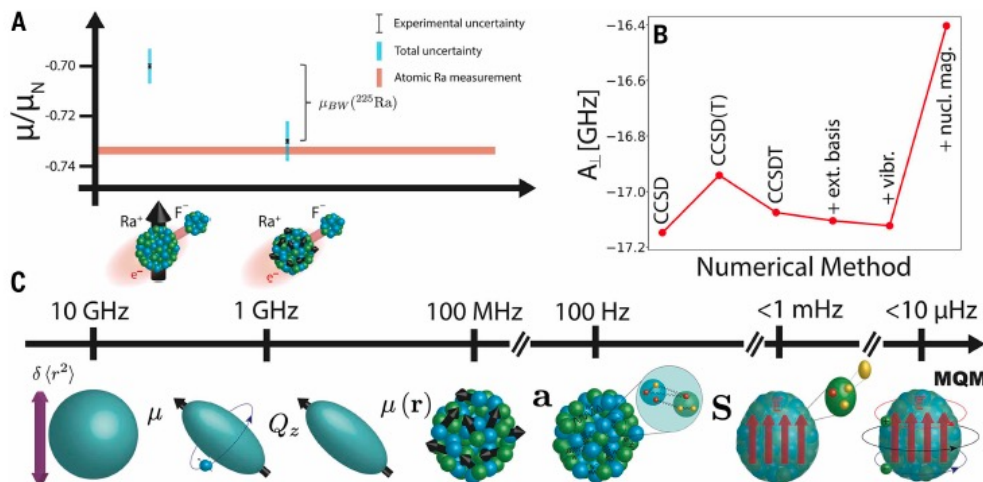
NUCLEAR PHYSICS

Observation of the distribution of nuclear magnetization in a molecule

$$A^{BW} = \frac{\mu}{I\Omega} (\mathcal{P}_s + \beta \mathcal{P}_p) B_s$$

Pure electronic part

Universal nuclear model-dependent parameter



- ✓ Впервые для молекулы RaF используя теорию [L.V. Skripnikov, J. Chem. Phys. "Nuclear magnetization distribution effect in molecules: Ra+ and RaF hyperfine structure" 153, 114114 (2020)] и эксперимент [S.G. Wilkins, "Observation of the distribution of nuclear magnetization in a molecule", *Science*, 390, 386 (2025)] удалось зафиксировать и извлечь эффект распределения намагниченности в ядра.

- ✓ Вычислены константы T,P-нечётных взаимодействий в молекула RaF на уровне точности, на порядок превосходящие все предыдущие.

Группа физики ядра и элементарных частиц в молекулах. (рук. Скрипников Л.В.)

nature communications



Article

<https://doi.org/10.1038/s41467-025-55977-w>

Electron correlation and relativistic effects in the excited states of radium monofluoride

Received: 28 August 2024

Accepted: 2 January 2025

Published online: 03 March 2025

M. Athanasakis-Kaklamanakis^{1,2,3}✉, S. G. Wilkins^{4,5}✉, L. V. Skripnikov²⁵,
Á. Koszorús^{1,2}, A. A. Breier^{6,7}, O. Ahmad², M. Au^{8,9}, S. W. Bai¹⁰, I. Belošević¹¹,
J. Berbalk¹², R. Berger¹², C. Bernerd⁸, M. L. Bissell¹³, A. Borschevsky¹⁴,
A. Brinson⁴, K. Chrysalidis¹⁵, T. E. Cocolios¹⁶, R. P. de Groote², A. Dorne²,
C. M. Faiardo-Zambrano², R. W. Field¹⁵, K. T. Flanagan^{13,16}, S. Franchoo^{17,18}.

Table 1 | Comparison of experimental and theoretical electronic excitation energies (T_0 , in cm^{-1}) in RaF

State	Experiment	Theory	Agreement
$X^2\Sigma_{1/2}$	0	0	
$A^2\Pi_{1/2}$	13,284.427(1) _{stat} (20) _{syst} ^a	13,299(36)	99.89
$B^2\Delta_{3/2}$	14,333.00(161) _{stat} (51) _{syst}	14,300(61)	99.77
$(B^2\Delta_{5/2})$	15,140.36(48) _{stat} (51) _{syst}	15,099(70)	99.73
$A^2\Pi_{3/2}$	15,335.73(49) _{stat} (62) _{syst}	15,355(35)	99.87
$C^2\Sigma_{1/2}$	16,612.06(18) _{stat} (51) _{syst}	16,615(69)	99.98
$D^2\Pi_{1/2}$	22,289.47(29) _{stat} (51) _{syst}	22,320(169)	99.86
$D^2\Pi_{3/2}$	22,651.09(31) _{stat} (51) _{syst}	22,673(170)	99.90
$E^2\Sigma_{1/2}$	25,451.12(11) _{stat} (26) _{syst}	25,520(84)	99.73
$F^2\Sigma_{1/2}$	27,919.57(180) _{stat} (51) _{syst}	28,019(257)	99.64
$G^2\Pi_{1/2}$	28,774.07(51) _{stat} (35) _{syst}	28,824(111)	99.83
$G^2\Pi_{3/2}$	29,225.64(25) _{stat} (51) _{syst}	29,284(90)	99.80
$(H^2\Sigma_{1/2})$	29,665.54(67) _{stat} (51) _{syst}	29,663(156)	99.99
$(I^2\Delta_{3/2})$	29,693.15(24) _{stat} (51) _{syst}	29,715(102)	99.92
$(I^2\Delta_{5/2})$	29,801.59(7) _{stat} (35) _{syst}	29,852(106)	99.83

✓ Благодаря предсказанным до эксперимента спектрам и свойствам молекулы RaF экспериментаторам удалось выполнить измерения в заданном диапазоне энергий, а также выполнить идентификацию спектральных линий. Благодаря этому было получено подтверждение теоретических подходов, разрабатываемых в ОКФХ

[M. Athanasakis-Kaklamanakis, S. G. Wilkins, L. V. Skripnikov, Á. Koszorús at al., *Nature Communications* **16**, 2139 (2025)]

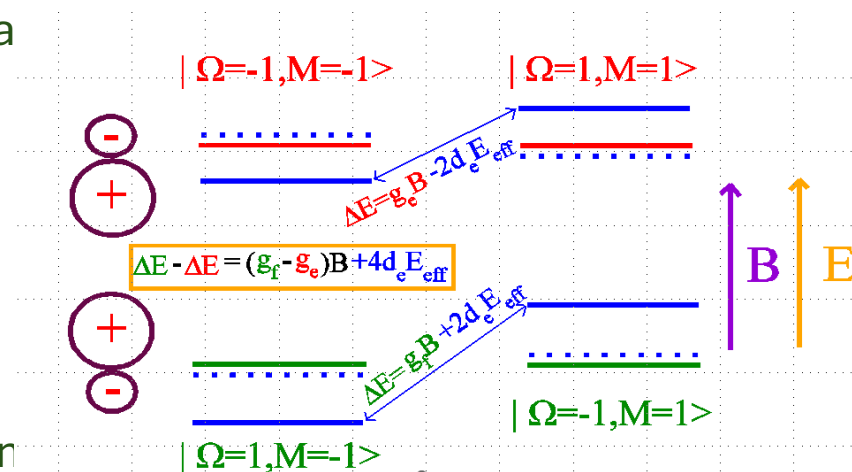


Лаборатория квантовой химии ОКФХ (Петров А.Н.) + ГФЯЭЧМ (Скрипников Л.В.)

Электрический дипольный момент электрона (еЭДМ): Теория

(это свойство, которое нарушает симметрию инверсии пространства и обращения времени; его измерение сможет пролить свет на проблему барионной асимметрии Вселенной)

- ✓ Выполнен анализ систематических ошибок эксперимента по измерению еЭДМ для молекулярного катиона ThF^+ , связанных с *неучтённым магнитным полем*.
- ✓ Получены значения g-факторов молекулы как функции внешнего электрического поля.
- ✓ На основе этих данных проанализированы три типа систематических ошибок.
- ✓ Установлено преимущество ThF^+ над катионом HfF^+ , на котором установлено текущее ограничение на еЭДМ $< 4 \cdot 10^{-30} \text{ e} \cdot \text{cm}$
- ✓ **Впервые** получены необходимые численные параметры для анализа будущих экспериментов на ThF^+ и продемонстрирована его перспективность для нового поколения экспериментом в поиску ЭДМ электрона.



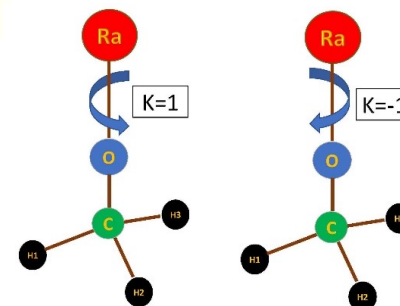


Лаборатория квантовой химии ОКФХ (зав. Петров А.Н.)

К-удвоение в молекуле RaOCH_3

$$\Delta E(\text{YbF}) \approx 10 \text{ GHz} \quad \Delta E(\text{YbOH}) \approx 20 \text{ MHz} \quad \Delta E(\text{HfF}^+) = 738 \text{ kHz}$$

$$\Delta E(\text{RaOCH}_3) \approx \mathbf{20 \text{ kHz}}$$



- Наилучшие ограничения на еЭДМ были получены в экспериментах с двухатомными молекулами ThO ($d_e < 1.1 \cdot 10^{-29} \text{ e} \cdot \text{cm}$) и HfF^+ ($d_e < 4.1 \cdot 10^{-30} \text{ e} \cdot \text{cm}$).
- Сложная структура **возбужденных** электронных состояний Ω -дублетов ThO и HfF^+ делает их непригодными для лазерного охлаждения, но структура Ω -дублетов крайне важна для подавления систематики (= точность эксперимента)
- Многоатомные молекулы типа симметрического волчка такие как YbOCH_3 , RaOCH_3 и др. **в основном** колебательном и электронном состоянии обладают структурой К-удвоения, которая не препятствует лазерному охлаждению
- **Разработан метод расчета** и оценена величина К-удвоения для RaOCH_3 которая оказалась меньше соответствующих величин для других перспективных молекул, что очень благоприятно для точности эксперимента



Группа квантовой электродинамики атомных систем ОКФХ (рук. Шабает В.М.)

КЭД расчёты $1s^2(2p2p)$ состояний бериллиеподобных ионов
и $2s2p\ ^1P_1 - 2s2s\ ^1S_0$ переходов в S^{12+} и Cl^{13+}

- Завершены *ab initio* расчёты энергий возбуждения внутри L оболочки в бериллиеподобных многозарядных ионах: рассмотрены $2p2p\ ^{2S+1}P_J$ состояния.
- Выполнены высокоточные расчёты энергий возбуждения $2s2p\ ^1P_1$ состояний в ионах S и Cl .
- Сильное перемешивание уровней одинаковой симметрии рассмотрено в рамках КЭД теории возмущений для квазивыврожденных уровней.
- Разработанный подход совмещает строгое КЭД рассмотрение в TB2 и учёт корреляционных эффектов третьего и более высоких порядков, рассчитанных в брейтовском приближении.
- Получены наиболее точные теоретические предсказания, которые в целом находятся в прекрасном согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Z	Верхнее сост-е	Нижнее сост-е	Данная работа (эВ)	Эксперимент (эВ)
16	$2s2p\ ^1P_1$	$2s2s\ ^1S_0$	48.30254(54)	48.3021(10)
17	$2s2p\ ^1P_1$	$2s2s\ ^1S_0$	52.13605(67)	52.1372(14)
18	$2p2p\ ^3P_2$	$2s2s\ ^1S_0$	77.89962(63)	77.9003(36)
54	$2p2p\ ^3P_1$	$2s2p\ ^3P_0$	533.7306(68)	533.733(22)

[A. V. Malyshev, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, and I. I. Tupitsyn, Phys. Rev. A 112, 062811 (2025)]

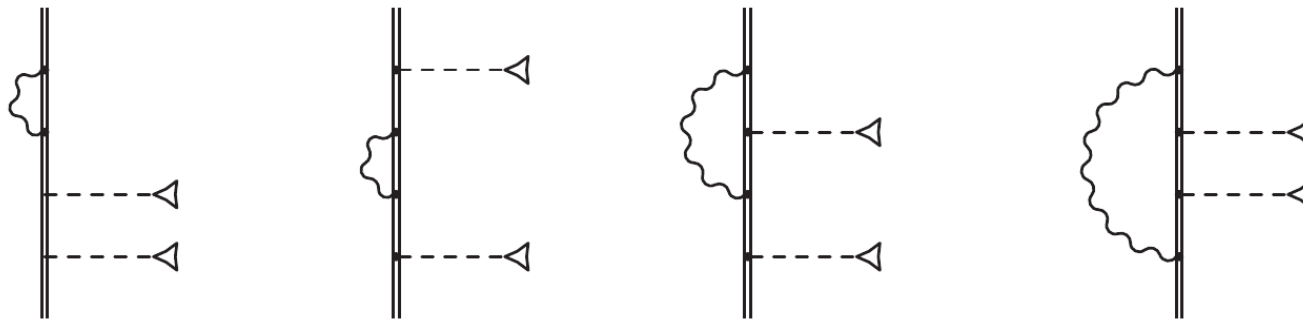
[X. P. Zhou et al., Phys. Rev. A 112, 062815 (2025)]



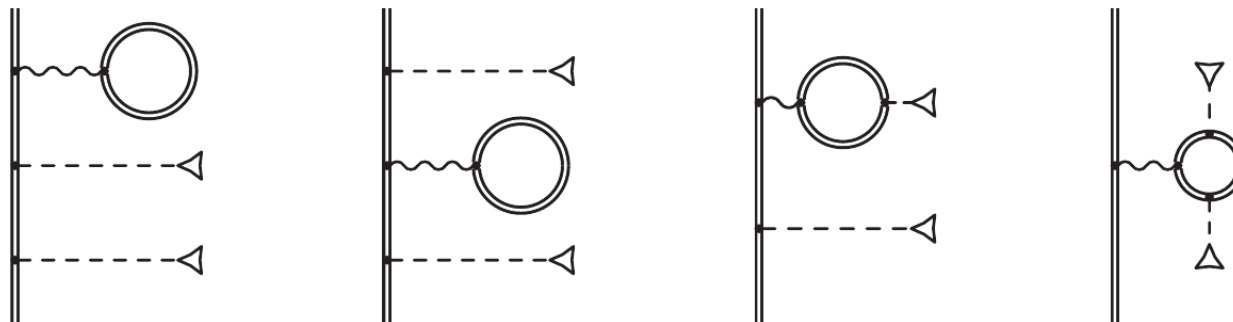
Группа квантовой электродинамики атомных систем ОКФХ (рук. Шабает В.М.)

КЭД поправки к квадратичному эффекту Зеемана в водородоподобных многозарядных ионах

- Выполнены *ab initio* расчёты одноэлектронных КЭД поправок к *квадратичному* по магнитному полю вкладу в расщепление уровней 1s, 2s и 2p_{3/2}.
- Поправки на собственную энергию рассмотрены в рамках строгого КЭД-подхода.



- Поправки на поляризацию вакуума рассмотрены в приближении электрической петли.

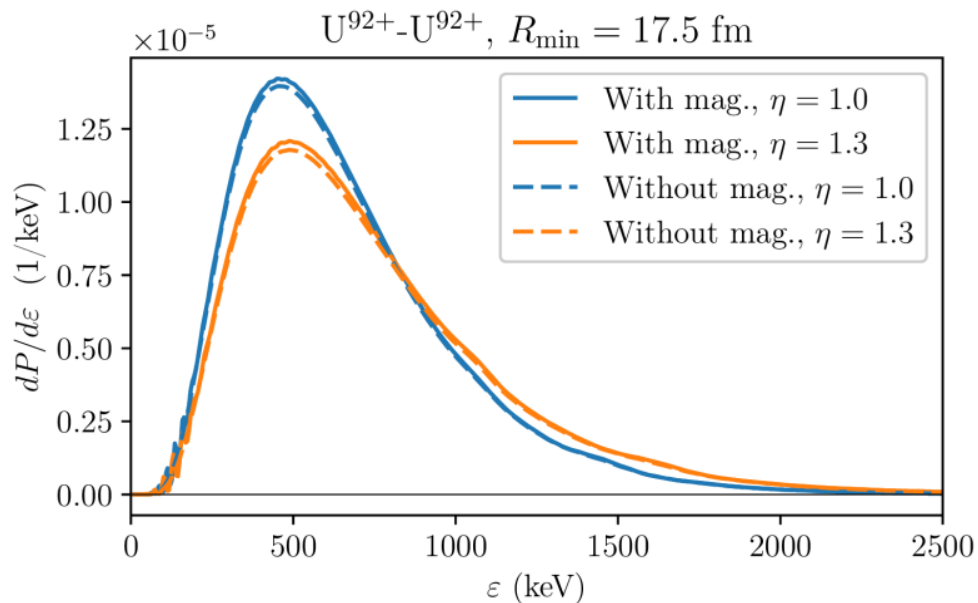




Группа квантовой электродинамики атомных систем ОКФХ (рук. Шабает В.М.)

Спонтанное рождение e^-e^+ пар в сверхкритических кулоновских полях

- Исследовано влияние вращения межъядерной оси и магнитного поля на процесс рождения электрон-позитронных пар в низкоэнергетических столкновениях тяжёлых ядер.
- Влияние эффектов вращения межъядерной оси на вероятности рождения пар и энергетические спектры позитронов является пренебрежимо малым для столкновений с малыми прицельными параметрами и энергиями вблизи кулоновского барьера.



- Учёт магнитного поля немного повышает вероятность рождения пар. Свидетельства перехода в сверхкритический режим в энергетических спектрах позитронов сохраняются.

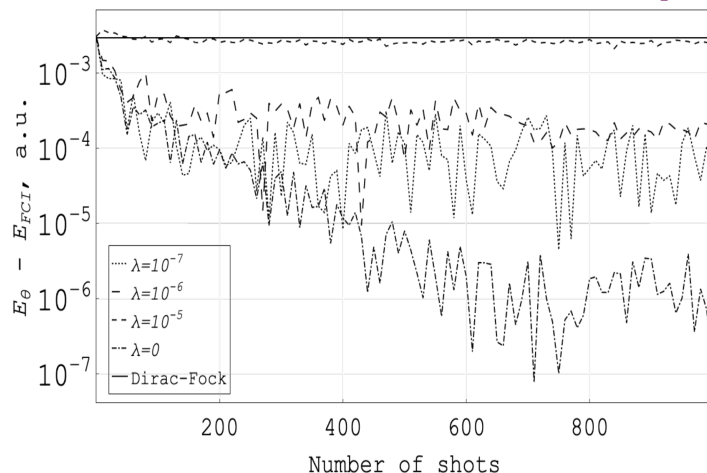
[Р. В. Попов и др., Письма в ЭЧАЯ 22, 200 (2025)]

[N. K. Dulaev et al., Phys. Rev. D 112, 116016 (2025)]



Группа квантовой электродинамики атомных систем ОКФХ (рук. Шабает В.М.)

Расчёт атом московия (e115, eka-Bi) с помощью квантовых алгоритмов в присутствии шумов



- Были проведены расчёты энергии основного состояния атома московия с помощью алгоритма VQE с dUCC-SD анзацем
- Эмулировался квантовый расчёт на **6-ти кубитах для 5-ти активных электронов**
- Используемая модель шумов: двухкубитное фазовое демпфирование

Учет симметрий при построении анзацев

Noise level	$E - E_{FCI}$, a.u.
10^{-9}	4.9×10^{-6}
10^{-8}	9.9×10^{-6}
10^{-7}	4.7×10^{-5}
10^{-6}	4.8×10^{-4}
10^{-5}	2.5×10^{-3}

- Было показано, что при увеличении уровня шума точность расчёта резко ухудшается при неизменной скорости сходимости
- Из проведенных расчётов следует, что наличие шумов серьезно ограничивает точность VQE расчётов даже для небольшого базиса



Группа прецизионной спектроскопии атомных систем ОКФХ (рук. Соловьев Д.А.)

Физические и химические свойства молекул в критических условиях: Постановка задачи (теория)

- исследования фундаментальных процессов в лабораторных и астрофизических условиях
- проверка фундаментальных взаимодействий
- влияние критических условий на молекулярные соединения
- диамагнитный тип связи
- реализован специализированный метод связанных кластеров CCSD(T) для точного описания атомов и молекул в сильных магнитных полях

В рамках приближения Борна-Оппенгеймера гамильтониан молекулы с N -электронами:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_{i=1}^N \left(A(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{p}_i + B(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{s}_i + \frac{1}{2} A^2(\mathbf{r}_i) \right)$$

\hat{H}_0 – гамильтониан системы без поля, второе слагаемое - зависящая от поля часть гам-на

решается обобщенная задача
на собственные значения для
уравнений Хартри-Фока-Рутана

$$FC = \varepsilon SC$$

- используя библиотеку GQCP внедрена CCSD(T) процедура
- реализована комплексная арифметика с соответствующей модификацией функций библиотеки PySCF

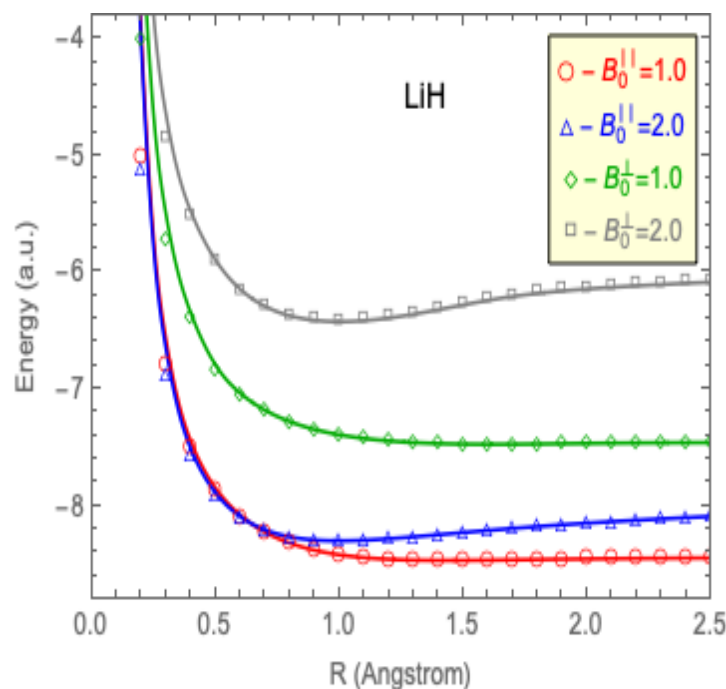
МЕТОД ПРИМЕНЕН К ЛЕГКИМ ДВУХАТОМНЫМ МОЛЕКУЛАМ



Группа прецизионной спектроскопии атомных систем ОКФХ (рук. Соловьев Д.А.)

Прецизионное описание двухатомных молекул в сильных магнитных полях: Основной результат

- Разработан метод прецизионного вычисления молекулярных адиабатических потенциальных кривых
- В качестве примера рассмотрены молекулы: H_2 , HeH^+ , LiH
- Рассчитаны равновесные расстояния, дипольные моменты (permanent и transition), построена вибрационная структура уровней
- Представлено описание параллельной и перпендикулярной ориентации поля (относительно оси молекулы)
- Рассмотрены поля 0.0, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0 и 2.0 атомных единицы ($1 \text{ a.u.} = 2.35 \cdot 10^5 \text{ T}$)



Отталкивающее триплетное $a^3\Sigma^+$ состояние становится связывающим в магнитных полях превышающих 1 а.е. (диамагнитная связь)

Определен вибрационный спектр молекул с высокой точностью - *возможность аккуратного определения величин магнитных полей астрофизических объектов*

[T. Zalaliutdinov and D. Solov'yev, J. Chem. Phys. 163, 034115 (2025)]

Продолжены исследования:

- Свойства контура спектральной линии в прецизионных спектроскопических измерениях

[Phys. Rep. 1114, 1-40 (2025); J. Phys. B 58 055001(2025)]

- Влияние излучения чёрного тела на метрологические характеристики кандидатов в атомные часы:

[Phys. Rev. A 112, 052807 (2025)]

- Квази-молекулярные системы содержащие антипротон

[Phys. Lett. A, 130808 (2025)]



Мюонная группа ОКФХ (рук. Андреев О.Ю.)

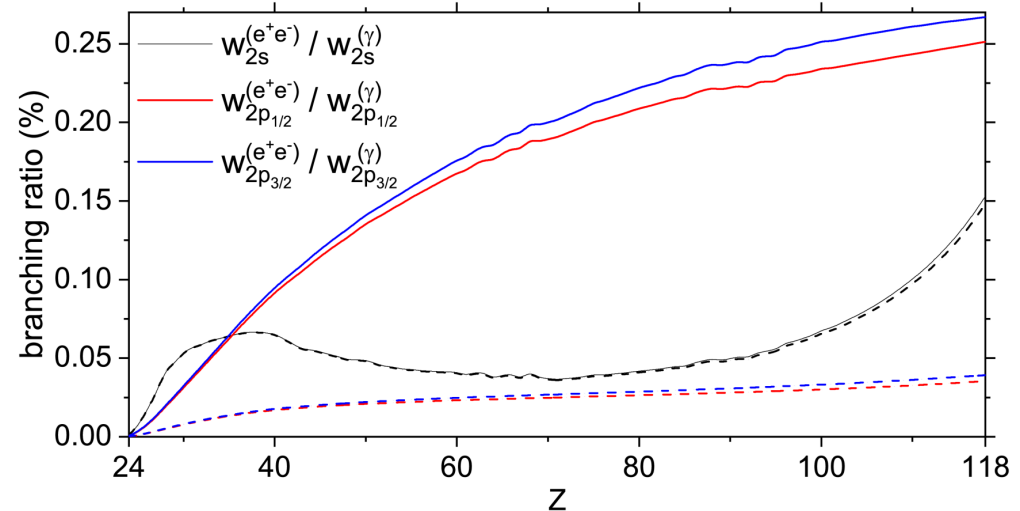
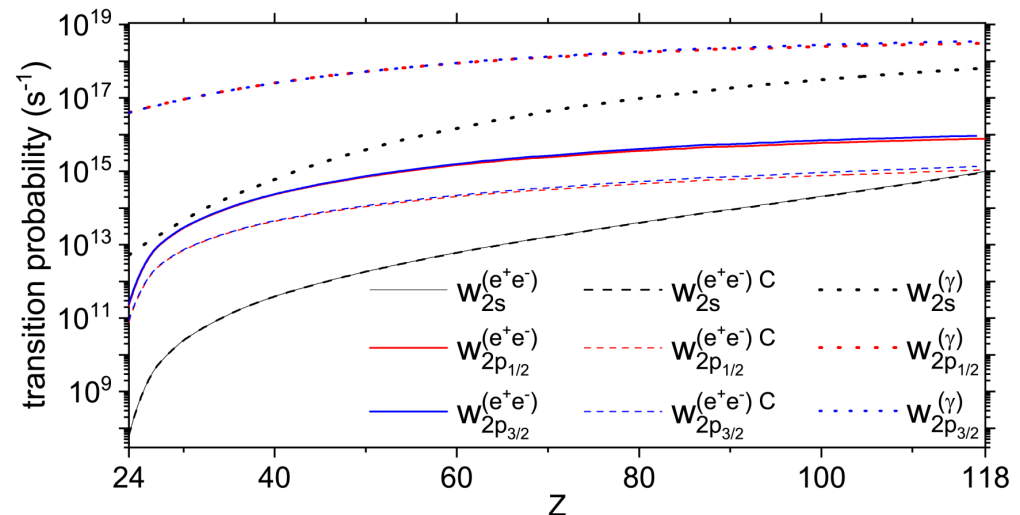
Связанно-связанные переходы мюона в мюонных атомах: «другая новая физика»

✓ Впервые исследованы нерadiационные переходы с рождением электрон-позитронных пар в мюонных атомах.

Установлено, что для переходов $2s \rightarrow 1s$ доминирующий механизм рождения ЭПП — кулоновское взаимодействие, тогда как для переходов $2p \rightarrow 1s$ — брейтовское взаимодействие.

Продemonстрировано, что основной вклад в рождение ЭПП вносят именно переходы $2p \rightarrow 1s$. Таким образом, главным механизмом генерации ЭПП в данных процессах оказывается брейтовское взаимодействие. Для переходов $2p \rightarrow 1s$ его вклад превосходит кулоновский в 3–7 раз.

✓ Исследован энергетический спектр рождающихся пар. Обнаружено, что энергетическое распределение электронов и Позитронов определяется преимущественно Брейтовским взаимодействием.



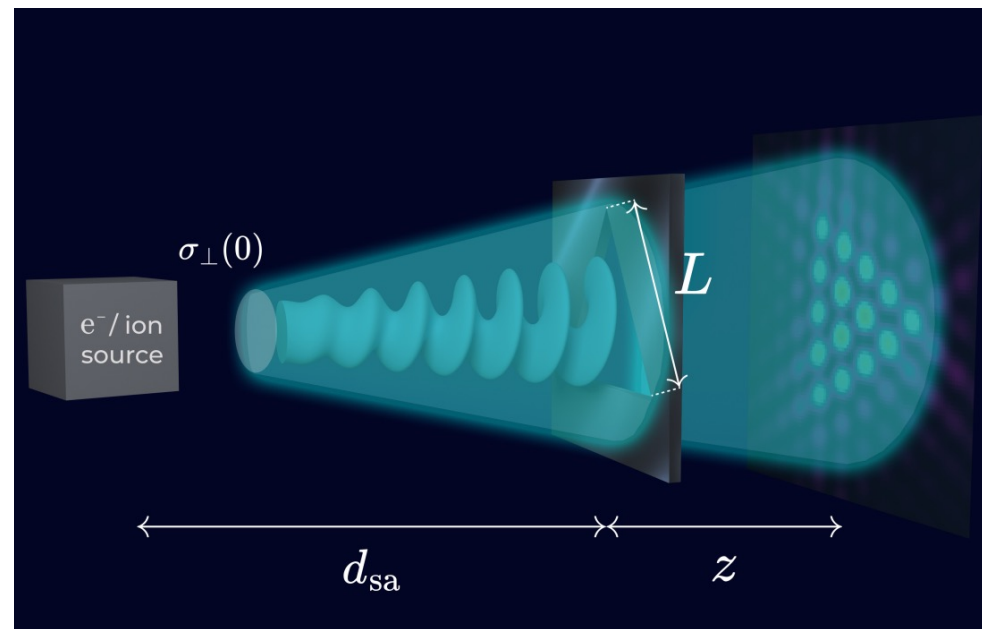
[O.Yu. Andreev, D. Yu, K.N. Lyashchenko, D.M. Vasileva, *Chinese Physics Letters* **42**, 090301 (2025)]

[O.Yu. Andreev, D. Yu, K.N. Lyashchenko, D.M. Vasileva, *submitted to PRA* (2025)]

Группа квантовой динамики волновых пакетов ОКФХ (рук. Карловец Д.В.)

Дифракция частиц на круглых и треугольных апертурах как способ обнаружения закрученных волн материи

- Предложен новый способ *диагностики орбитального углового момента (ОУМ)* одиночных закрученных частиц/пучков.
- По *дифракционному рисунку* в дальней зоне можно однозначно восстановить величину и знак **ОУМ**.
- Данный метод работает при энергиях от 100 кэВ до 5 МэВ и может быть реализован на установках ЛЯП ОИЯИ.

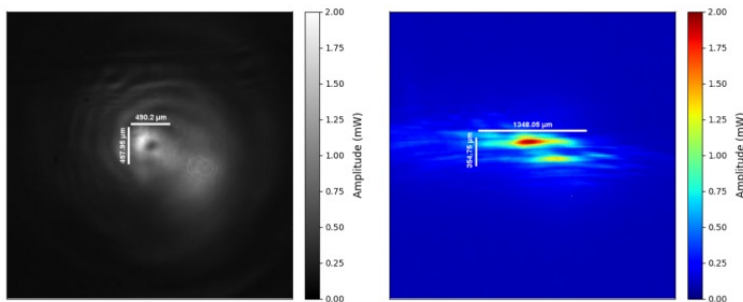
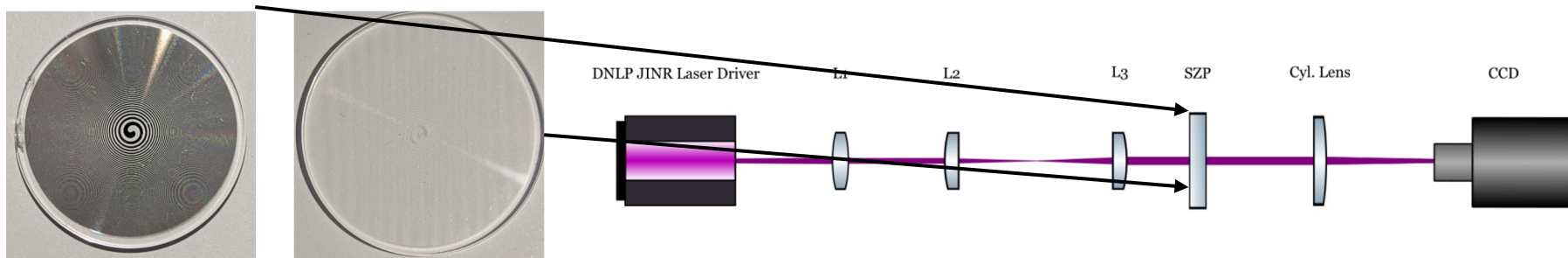


[Maksimov et al., Phys. Rev. A **112**, 062823 (2025) <https://doi.org/10.1103/z2rs-2ryl>]

$\sigma_{\perp}(0)$ - начальная ширина волнового пакета частицы,
 d_{sa} - расстояние между источником частиц и апертурой, L – размер апертуры, z – расстояние от апертуры до экрана

Группа квантовой динамики волновых пакетов ОКФХ (рук. Карловец Д.В.)

Генерация вихревых пучков в УФ-диапазоне с помощью амплитудных и фазовых зонных пластинок



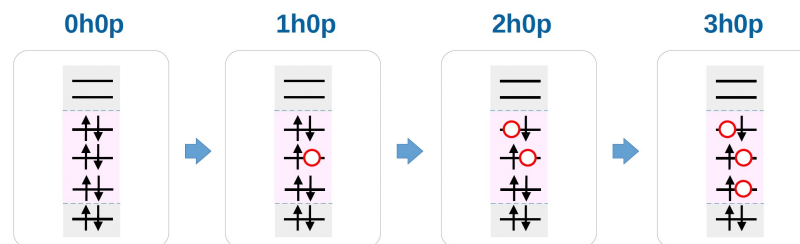
- Разработаны и созданы оптические элементы для генерации вихревых лазерных пучков в глубоком УФ (262 нм) с орбитальным угловым моментом $\ell = 1$
- Эффективность конверсии достигает 40 %
- Эксперимент проводился на фотоинжекторном лазере (ЛЯП ОИЯИ)
- Планируется использование лазерной установки для передачи углового момента релятивистским электронам

[Dyatlov et al., Applied Optics **64**, 10776 (2025)
<https://doi.org/10.1364/AO.578189>]

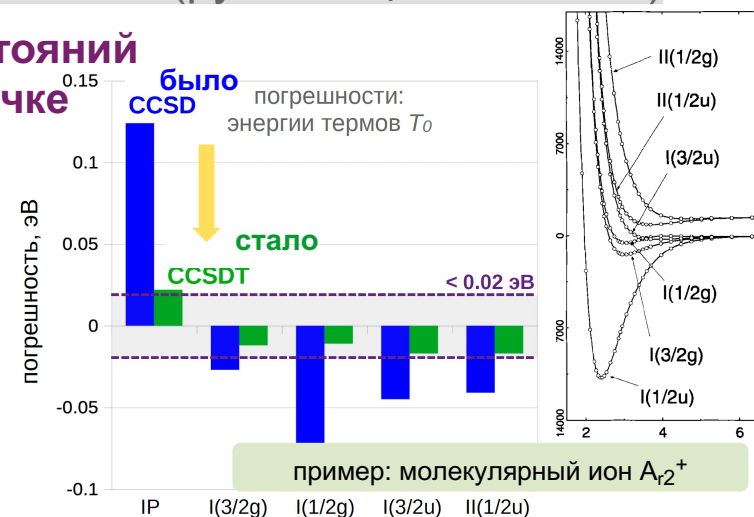


Группа релятивистских многочастичных систем ОКФХ (рук. Зайцевский А.В.)

Релятивистский метод связанных кластеров для состояний молекул/кластеров, 2 или 3 дырки в замкнутой оболочке

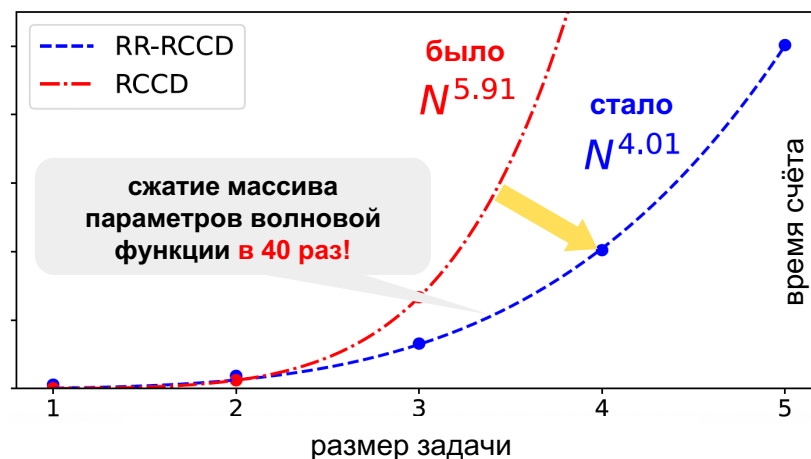
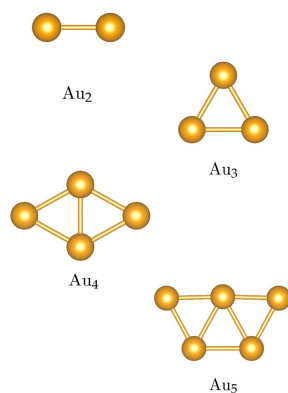


- впервые в мире: CCSDT, 3h0p
- погрешность оценок энергий возбуждения $< 0.02 - 0.05$ эВ
- метод реализован в пакете программ **EXP-T**

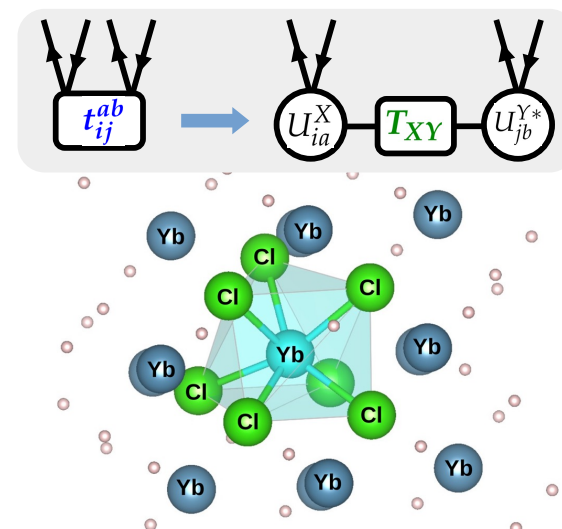


A.V. Oleynichenko et al, *J. Chem. Phys.* 163, 224123 (2025)

Разработка методов связанных кластеров, опирающихся на тензорные разложения



[A. V. Oleynichenko et al, *J. Chem. Phys.* 163, 044113 (2025)]



материал:
хлорид иттербия(II) YbCl_2

- резкое снижение вычислительной сложности **без потери точности!**
- цель: моделирование примесных центров в материалах на основе f -элементов



Группа релятивистских многочастичных систем ОКФХ (рук. Зайцевский А.В.)

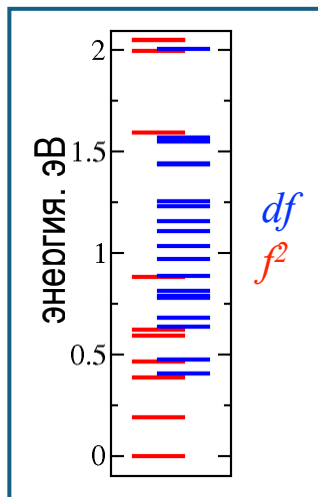
Разработка средств моделирования электронных переходов в молекулах и кластерных моделях твердотельных соединений актинидов при помощи квазирелятивистской теории возмущений

в основе - оригинальные варианты квазивырожденной многочастичной ТВ

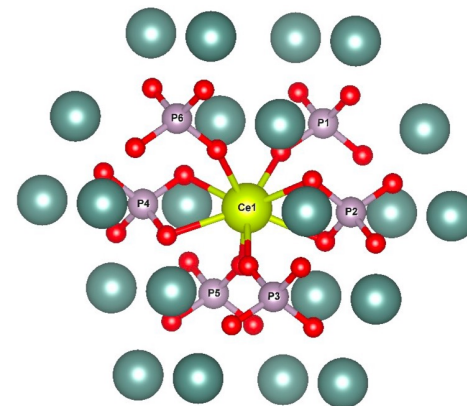
- ТВ с множественными разбиениями гамильтониана (MPPT)
- ее расширение с обобщенными купмансовскими орбиталями (NOPT)
+ новая экономичная схема включения спин-орбитальных взаимодействий

программные разработки

- интерфейс к программам расчета с гатчинскими GRPP
- параллелизация вычислений (MPPT)
- сквозное использование разложения единицы (NOPT)



- ✓ моделирование электронных спектров систем с десятками атомов
- ✓ гарантированная численная устойчивость
- ✓ 10^2 - 10^3 возбужденных состояний одновременно
- ✓ точность оценок энергий переходов не хуже 0.1 эВ (~ как FS RCCSD)
в том числе для $f-d$ переходов



Группа квантовой механики ОКФХ (рук. Титов А.В.)

Расчёты актинидов в кристаллах титано-ниобатов в рамках кластерной модели СТЕР

Впервые рассчитано состояние примесных атомов урана, плутония и минорных актинидов в кристаллах CaNb_2O_6 и YNbTiO_6

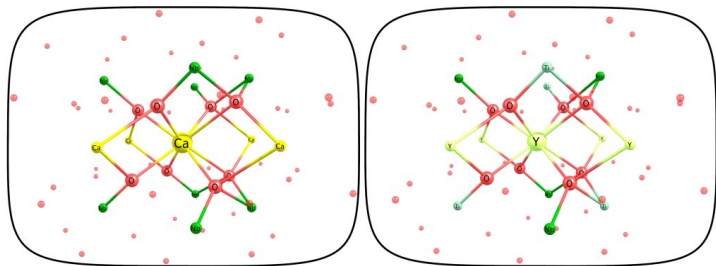


Рис 1: Одноцентровые кластеры $\text{CaO}_8@\text{СТЕР}$ и $\text{YO}_8@\text{СТЕР}$

- ✓ Локальная геометрия оказалась близкой для атомов разных актинидов в одинаковых степенях окисления
- ✓ Результаты позволяют экстраполировать имеющиеся экспериментальные данные для устойчивости урана в титано-ниобатных матрицах на остальные актиниды (Np, Pu, Am, Cm).
- ✓ Применимость одноцентровой модели была оценена для урана в сравнении с расширенной трёхцентровой, в которой кроме большей релаксации окружения можно учесть влияние вакансий, компенсирующих изменение заряда.

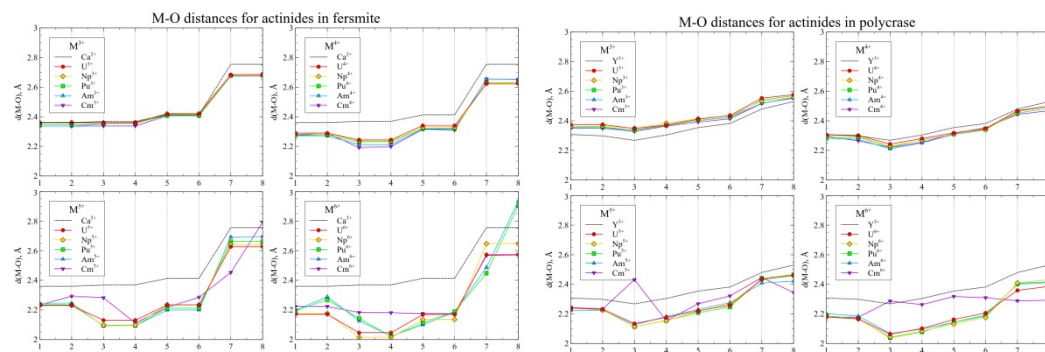


Рис 2-3: Расстояния М-О в кластерах с замещением центрального атома (Ca, Y) на примесный актинид ($M=\text{U}, \text{Np}, \text{Pu}, \text{Am}, \text{Cm}$)

[D.A. Maltsev et al. “Electronic structure study of YNbTiO_6 and CaNb_2O_6 with actinide impurities using compound-tunable embedding potential method”, *Scientific Reports* 15, 10645 (2025)]

В реальном кристалле YNbTiO_6 атомы Nb и Ti статистически распределены, занимая одни и те же позиции с вероятностью 50%.

Для оценки эффектов случайного распределения были построены кластеры для окружения Nb и Ti, в которых были проведены замещения $\text{Nb} \rightleftharpoons \text{Ti}$.

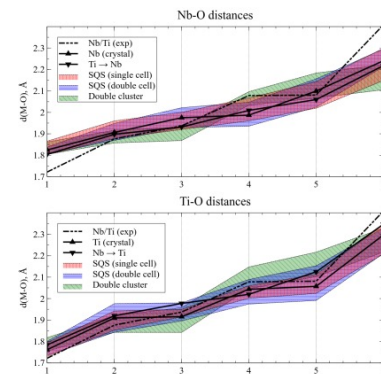


Рис 4: Расстояния Nb-O и Ti-O в кластерах с замещениями $\text{Nb} \rightleftharpoons \text{Ti}$ в сравнении с результатами метода SQS.



Группа квантовой механики ОКФХ (рук. Титов А.В.)

Исследование электронной структуры кристаллов галогенидов иттербия

Впервые вычислены химические сдвиги (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС) в кристаллах с f-элементом в составе с использованием разработанного нами подхода.

Особенности нового подхода:

- ✓ **Универсальность:** выполнимы *ab initio* исследования соединений любых элементов таблицы Менделеева.
- ✓ **Высокая надежность:** прецизионное моделирование свойств «атомов-в-материалах» для d- и f-материалов.
- ✓ **Применимость:** новые возможности для исследования инновационных материалов со сложной структурой.

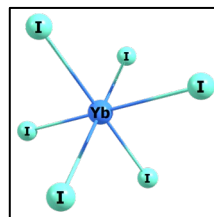
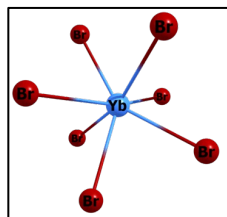
В статье 2025 г. по хим.сдвигам РЭС опубликованы первые прецизионные результаты (GRPP+NOCR+CC):

[Khadeeva P. A., Shakhova V. M., Lomachuk Y. V., Mosyagin N. S., Titov A. V. // Mol. Phys. 2025. p. e2483881]

Работа удостоена премии им. Курчатова в 2025

Текущие направления работы

Исследование кристаллов с ионно-ковалентной связью YbHal_n , где ($\text{Hal} = \text{Br}, \text{I}; n = 2, 3$):



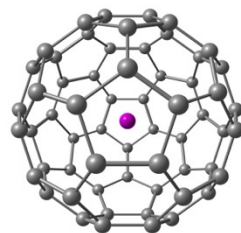
Оптимизация кластеров для галогенидов иттербия с расширенными базисными наборами и псевдопотенциалами для последующего исследования свойств на тяжелом атоме с использованием метода связанных кластеров с пониженным рангом (RR-RCCSD):

RR-RCCSD \approx 1000 спиноров !!!

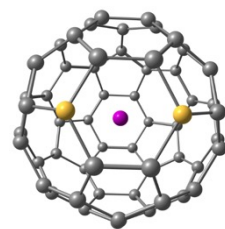
Рис 1: Основной кластер YbBr_2 Рис 2: Основной кластер YbI_2



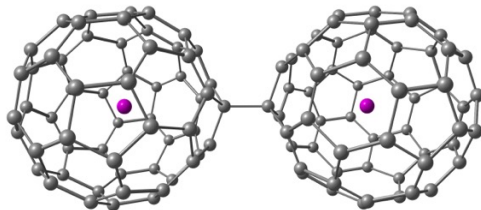
Квантово-химическое исследование эндоэдральных комплексов



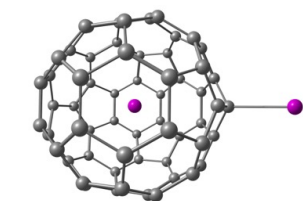
$X@C_{60}$



$X@C_{58}B_2$



$^1(I@C_{60}^+)_2$



$I@[C_{60}I]^+$

Методом DFT (U)PBE0 определены структурные параметры, спиновые состояния, энергии внедрения и ИК спектры эндоэдральных комплексов $I^-@C_{60}$, $I^-@C_{60}^+$, $I^-@C_{58}B_2$, $I^-@[C_{58}B_2]^+$, $I^-@[C_{59}B]^+$, $I^-@[C_{60}I]^+$, $(I^-@C_{60}^+)_2$, $Te@C_{60}$, $Te@C_{58}B_2$, $Xe@C_{60}$ и $Xe@C_{58}B_2$.

Обсуждена возможность синтеза эндоэдральных комплексов с радиоактивным иодом и их применение в радиотерапии различных органов пациентов со здоровой щитовидной железой.

[M.E. Bedrina et al., Eur. Phys. J. D, 79, 54 (2025)]

Квантово-химическая концепция степени окисления атома

Предложен метод определения степени окисления Ξ в терминах квантовой теории многоэлектронных систем. Величина Ξ является разностью между атомным номером Z и числом локализованных в атоме одноэлектронных состояний: $\Xi = Z - \sum_j \text{Entier}(n_j + \varepsilon)$, где n_j – заселённость состояния j . Выполнены расчёты Ξ для $Ca^{I,II}$, P^{0-V} , S^{II-VI} , F^{-I} , O^{-II} и Kr^0 в молекулах $CaCB_{11}H_6Cl_6$, $CaCB_{11}H_{12}$, CaC_5H_5 , $Ca(C_5H_5)_2$, $Ca@C_{60}$, $P@C_{60}$, PF , PF_3 , PF_5 , POF_3 , P_4O_6 , P_4O_{10} , $OSSO$, SO_2 , SF_2 , SF_4 , SF_6 , SOF_4 , SO_2F_2 , S_3O_9 , $Kr@C_{60}$ и в ионах $[PO_4]^{3-}$, $[P_3O_9]^{3-}$, $[PF_6]^-$ и $[SO_4]^{2-}$. На примере $[PO_4]^{3-}$ показана инвариантность $\Xi = 5$ относительно выбора базисных орбиталей.

[Semenov S.G. et al., J. Phys. Sci. 80, 275 (2025)]



Отдел информационных технологий и автоматизации

Работа сотрудников ОИТА ОНР (+ ОИВРТ) по направлению 7 Темплана НИОКР

- В 2025 году было закуплено, протестировано и введено в эксплуатацию оборудование, которое позволило увеличить пропускную способность канала Гатчина-Санкт-Петербург до 100 гигабит в секунду, что позволит обеспечить передачу научных данных между площадками НИЦ "Курчатовский институт" в Москве и Гатчине на скоростях до 10 гигабайт в секунду;
- Обеспечена штатная работа ЦОД ПИК (суперкомпьютер Константинов) по выполнению задач пользователей. На конец 2025 года зарегистрирована 31 научная группа, всего 118 пользователей. Выполнено ~95 тыс. заданий (54,58 от 2024 года), затрачено ~30 000 000 часов вычислительного времени (88,15% от 2024 года).

*Спасибо за
внимание*