## ОТЧЕТЫ ПО ПРОЕКТАМ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ,ФИНАНСИРУЕМЫЕ РОССИЙСКИМ НАУЧНЫМ ФОНДОМ

## КРАТКИЕ НАУЧНЫЕ ОТЧЕТЫ ПО ПРОЕКТАМ РОССИЙСКОГО НАУЧНОГО ФОНДА

## ЗА 2014 – 2017 ГОДЫ

**ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**17-12-01427**

Руководитель проекта

**Блашке Давид**

Название проекта

Материя при экстремальных условиях в соударениях тяжелых ионов и в нейтронных звездах

Вид конкурса

Конкурс 2017 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2017–2019**

**Год представления отчета**

**2017**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Гипотеза существования кваркглюонной плазмы ядрах компактных звезд открывает возможности изучения так называемых гибридных звезд, в том числе звезд-близнецов (объектов с одинаковой массой, но различными радиусами). Сосуществование двух фаз, адронной и кварковой, сопряжено с необходимостью изучения формы фазового перехода. Для астрофизических исследований зачастую удобно дать феноменологическое описание уравнения состояния и фазового перехода. В проекте была предложена модель фазового перехода для которой параметром являлась поверхностное натяжение области соприкосновения фаз. На базе этой модели было изучено семейство устойчивых звездных конфигураций, которые можно сравнить с данными наблюдений пульсаров. Для сравнения результатов с наблюдаемыми данными был сформулирован и проведен баейсовский анализ, базирующийся на вероятностных оценках предсказаний модели. В этих расчетах мы включили актуальные данные, в том числе, полученные в результате недавнего наблюдения сигналов гравитационных волн от слияния нейтронных звезд в августе 2017 года (GW170817) [B.􀀀P. Abbott et al. PRL 119, 161101, 16.10.2017].

В веществе нейтронных звёзд возможно образование бозе-конденсатов различных мезонов. Однако, ранее они изучались с использованием моделей, которые не могут считаться реалистическими в свете новой информации о нейтронных звёздах. Их появление приводит к снижению максимальной предсказываемой массы нейтронных звёзд, что может помешать выполнению условия на максимальную массу по данным наблюдений. Поэтому важно учесть возможность мезонной конденсации в нейтронных звёздах, используя современные реалистические модели.

Описание мезонной конденсации требует информации о том, как изменяются свойства частиц и их взаимодействий в среде при больших плотностях. Её тяжело извлечь из эксперимента и вычислений из первых принципов, но можно изучать в рамках феноменологического подхода. В рамках данного проекта были исследованы возможные зависимости эффективной массы rho-мезона и скейлинговой функции, определяющей изменение взаимодействие rho-мезона с барионами в среде. Мы показали, что ограничение уменьшения эффективной массы rho-мезона в плотной среде позволяет уменьшить влияние появления rho-мезонного конденсата на максимальную массу нейтронной звезды.

Также мы продемонстрировали, что сделанный без включения rho-мезонного конденсата выбор скейлинговой функции rho-мезона является оптимальным, если учтено ограничение уменьшения массы rho-мезона в среде.

В 2017 году были получены первые результаты моделирования столкновений Au+Au с помощью нового генератора событий на основе трехжидкостной модели (3FD). В этих симуляциях рассмотрены следующие физические наблюдаемые: направленный поток, спектры по поперечной массе, а также быстротные распределения протонов, пионов и каонов для двух модельных уравнений состояния: одно с фазовым переходом первого рода, другое с переходом типа кроссовер. Также обсуждаются предварительные результаты по фемтоскопии. Анализ точности воспроизведения результатов 3FD новым генератором событий и эффектом последующей стадии дожигателя UrQMD.

Был проведен анализ недавних данных по выходу дейтронов и 3He в центральных столкновениях Pb + Pb при энергиях SPS в рамках модели трехжидкостной динамики. Обнаружено, что сценарии с переходом «деконфайнмент» предпочтительнее для быстротных распространений дейтронов и 3He. Соответствующие результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. В то же время расчетные спектры по поперечной массе 3He не согласуются с экспериментальными данными. Последнее, по-видимому, указывает на то, что коэффициенты коалесценции должны быть зависимыми от температуры и/или импульса.

Изучены вихревые явления в веществе, возникающие при нецентральных столкновениях тяжелых ионов при энергиях NICA. Моделирование проводилось в рамках модели трехжидкостной гидродинамики. Показано, что завихрение в основном находится на границе между участниками соударения и периферией. В частности, это означает, что относительная поляризация Λ-гиперонов должна быть сильнее в областях фрагментации, чем в центральной области.

Анализ направленного потока протонов, антипротонов и пионов в столкновениях тяжелых ионов выполнен в диапазоне энергий столкновений √sNN = 2,7-39 ГэВ. Обнаружено, что кроссовер EoS однозначно предпочтительнее для описания экспериментальных данных при энергиях столкновения √sNN ≤ 20 ГэВ. Однако при более высоких энергиях столкновения √sNN ≥ 20 ГэВ чисто адронное EoS снова становится выгодным. Это указывает на то, что EoS в кварк-глюонном секторе должно быть более жестким при высоких барионных плотностях, чем то, которое используется при расчете. Последнее наблюдение согласуется с тем, что обсуждалось в астрофизике в связи с существованием гибридных звезд с массами до двух солнечных масс.

***на английском языке***

The idea of the existence of a quark-gluon plasma in the inner cores of compact stars opens the possibility to study so-called hybrid stars, including twin stars (objects with the same mass but different radii). The coexistence of two phases, hadronic and quark ones, requires to study the details of the phase transition. For astrophysical research it is convenient to describe the equation of state and the phase transition using a phenomenological approach. Within the project we proposed a model for the phase transition, in which the parameter is the surface tension of the phase contact area. Based on this model, a family of stable stellar configurations that can be compared with observational data of pulsars has been studied. In order to compare the results of models with observational data, Baeysian analysis based on probabilistic estimations of model predictions was formulated and carried out. In these calculations, we included actual observational data, including those obtained as a result of the recent observation of gravitational wave signal from the neutron star merger event in August 2017 (GW170817) [B.􀀀P.

Abbott et al. PRL 119, 161101, 16.10.2017].

Formation of various meson condensates is also possible in the neutron star interiors. However, in earlier works they were studied within simpler models, which now cannot be claimed as realistic because of the new neutron star observational data. Their appearance leads to a decrease of a predicted neutron star maximum mass, which can violate the neutron star maximum mass constraint. Hence taking into account of the meson condensation is important for testing the modern realistic models. The description of the meson condensation requires knowledge of how do particle properties and their interactions change in the dense medium. It is hard to be extracted from experimental data or the ab initio calculations, but it can be studied within the phenomenological approach. In this project we studied possible dependences of the rho-meson effective mass and the rho-meson scaling function as functions of the scalar field in the medium. We demonstrated that a limiting of the rho-meson effective mass decrease in the dense medium allows for reducing the effect of the rho-meson condensation on the neutron star maximum mass. Also we showed that our choice of the rho-meson scaling function, which was made without the inclusion of the condensate, is the optimal one, if one limits the rho-meson effective mass decrease in the medium.

First results of simulations of Au+Au collisions within a new event generator based on the three-fluid hydrodynamics (3FH) approach were obtained. These simulations address the following topics: the directed flow, transverse-mass spectra, as well as rapidity distributions of protons, pions and kaons for two model equations of state: one with a first-order phase transition and the other with a crossover transition. Preliminary results on the femtoscopy are also discussed. We analyzed the reproduction accuracy of the 3FH results by the new event generator and the effect of the subsequent UrQMD afterburner stage.

Recent data on the deutron and 3He production in central Pb+Pb collisions at SPS energies were analyzed within the model of the three-fluid dynamics. It is found that scenarios with the deconfinement transition are preferable for reproduction of rapidity distributions of deuterons and 3He. The corresponding results well agree with the experimental data. At the same time the calculated transverse-mass spectra of 3He at midrapidity agree with the experimental data on the same level of accuracy. The latter apparently indicates that coalescence coefficients should be temperature and/or momentum dependent.

Vorticity of matter generated in noncentral heavy-ion collisions at energies of the NICA was studied. Simulations are performed within the model of the three-fluid hydrodynamics. It is demonstrated that the vorticity is mainly located at the border between participants and spectators. In particular, this implies that the relative Λ-hyperon polarization should be stronger at rapidities of the fragmentation regions than that in the midrapidity region.

Analysis of directed flow of protons, antiprotons and pions in heavy-ion collisions has been performed in the range of collision energies √sNN = 2.7 - 39 GeV. We found that the crossover EoS is unambiguously preferable for the description of experimental data at lower collision energies √sNN ≤ 20 GeV. However, at higher collision energies √sNN ≥ 20 GeV the purely hadronic EoS again becomes advantageous. This indicates that a realistic deconfinement EoS in the quark-gluon sector should be stiffer at high baryon densities than those used in the calculation. The latter finding is in agreement with the discussion in astrophysics in connection with existence of hybrid stars with masses up to about two solar masses.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Альварес-Кастильо Д., Блашке Д., Тупель Ш. (D. Alvarez-Castillo, D. Blaschke, S. Typel.)

Mixed phase within the multipolytrope approach to high-mass twins Astronomische Nachrichten (2017 г.)

2.Батюк П. Н., Блашке Д., Блейхер М., Иванов Ю. Б., Карпенко Ю., Малинина Л., Мерц С. П., Нахранг М., Петерсен Х., Рогачевский О. В. (P. Batyuk, D. Blaschke, M. Bleicher, Yu. B. Ivanov, Iu. Karpenko, L. Malinina, S. Merts, M. Nahrgang, H. Petersen, O. Rogachevsky)

Three-fluid Hydrodynamics-based Event Simulator Extended by UrQMD final State interactions (THESEUS)for FAIR-NICA-SPS-BES/RHIC energies The European Physical Journal Web of Conferences (2018 г.)

3.Блашке Д., Дубинин А. С., Эберт Д., Фризен А. В. (D. Blaschke, A. Dubinin, D. Ebert, A.V. Friesen)

Effects of composite pions on the chiral condensate within the PNJL model at finite temperaturePhysics of Particles and Nuclei Letters (2018 г.)

4.Иванов Ю. Б., Солдатов А. А. (Yu. B. Ivanov, A. A. Soldatov)

Light fragment production at CERN Super Proton Synchrotron The European Physical Journal A (2017 г.)

5.Иванов Юрий Борисович (Yuri B. Ivanov)

Directed Flow in Heavy-Ion Collisions and Its Implications for Astrophysics MDPI Universe (2017 г.)

6.Кляйн Т., Блашке Д. (Thomas Klähn, David B. Blaschke)

Strange matter in compact stars The European Physical Journal Web of Conferences (2018 г.)

7.Коломейцев Е. Э., Маслов К. А., Воскресенский Д. Н. (E. E. Kolomeitsev, K.A. Maslov*,* D.N. Voskresensky)

Charged ρ-meson condensation in neutron stars Nuclear Physics A (2018 г.)

8.Маслов К. А., Коломейцев Е. Э., Воскресенский Д. Н. (K.A. Maslov, E.E. Kolomeitsev, D.N. Voskresensky)

Charged rhomeson condensate in neutron stars within RMF models MDPI Universe (2017 г.)

9.Маслов К. А., Коломейцев Е. Э., Воскресенский Д. Н. (K.A. Maslov, E.E. Kolomeitsev, D.N. Voskresensky)

Delta resonances and charged rho mesons in neutron stars Journal of Physics: Conference Series (2017 г.)

10.Рёпке Г., Воскресенский Д. Н., Крюков И., Блашке Д. (Gerd Roepke, Dmitri Voskresensky, Ivan Kryukov, David Blaschke)

Fermi liquid, clustering, and structure factor in dilute warm nuclear matter Nuclear Physics A (2018 г.)

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**16-12-10306**

Руководитель проекта

**Казаков Дмитрий Игоревич**

Название проекта

Квантовая динамика суперсимметричных калибровочных теорий в различных измерениях

Вид конкурса

Конкурс 2016 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2016–2018**

**Год представления отчета**

**2016**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

В подходе гармонического суперпространства изучалась шестимерная N=(1,0)суперсимметричная модель абелева калибровочного мультиплета, взаимодействующего сгипермультиплетом. Развит метод фонового поля, проведено вычисление индекса расходимостии проанализирована структура возможных однопетлевых контрчленов. Используя суперполевой метод собственного времени и метод фонового поля в шестимерном гармоническом N=(1,0)суперпостранстве, вычислена расходящаяся часть однопетлевого эффективного действия, зависящая от фоновых векторного мультиплета и гипермультиплета. Соответствующие контрчлены содержат как вклады, зависящие только от фонового векторного мультиплета, так исмешанные вклады, содержащие фоновые векторный мультиплет и гипермультиплет. Показано,что модель является конечной в однопетлевом приближении на классических уравнениях движения в секторе векторного мультиплета, что согласуется с известными ранее результатами.

Также установлено, что расходимости в смешанном секторе не могут быть устранены никаким переопределением полей и в целом теория является расходящейся на массовой поверхности в однопетлевом приближении. Эти результаты представлены в работе [Buchbinder I.L., Ivanov E.A., Merzlikin B.S., Stepanyantz K.V., Phys. Lett. 763B (2016) 375; arXiv:1609.00975 [hep-th]; http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269316306311], опубликованной участниками данного проекта. Отмечена аналогия между построением 6D, N=(2,0) суперполей в шестимерном N=(1,0) гармоническом суперпостранстве и построением суперполей 6D векторного мультиплета в N=(1,0) гармоническом суперпространстве. Также отмечена аналогия между построением ведущих низкоэнергетических вкладов разной размерности на массовой оболочке в 6D, N=(1,1) теорией Янга-Миллса и построением аналогичных вкладов в 4D, N=4 теории Янга-Миллса.

Проведён численный анализ уравнений для суммы лидирующих расходимостей теории для D=6,8,10 измерений. Результаты были сопоставлены с теорией возмущений и аналитическими решениями для бесконечных "лестничных" сумм во всех рассмотренных измерениях. Сравнение численных и аналитических решений показало, что основные свойства поведения расходимостей в теории полностью описываются "лестничными" решениями. Было показано численно, что точное решение для бесконечных сумм расходимостей теории имеет то же бесконечно полюсное решение, как и "лестницы" для соответствующий размерностей пространства. При этом, численные решение имеют близость к самим "лестничным" решением. Эти результаты опубликованы в работе [Borlakov A.T., Kazakov D.I., Tolkachev D.M., Vlasenko D.E.; arXiv:1610.05549 [hep-th], https://arxiv.org/abs/1610.05549].

Проведено исследование амплитуд рассеяния в максимально суперсимметричной теории Янга-Миллса (модельной теории которая качественно описывает высокоэнергетическое поведение КХД). Данное исследование позволило, для случая амплитуд рассеяния на внешнем поле (форм факторов), получить точное решение для "древесной" S-матрицы теории в виде интеграла по Грассманиану. Этот результат важен как с чисто теоретической точки зрения, так как, например, позволяет лучше понять связь максимально суперсимметричной теории Янга-Миллса с твисторными теориями струн, так и для физики элементарных частиц, поскольку полученные аналитические результаты используются в КХД расчётах. Результаты представлены в работе [Bork L.V., Onishchenko A.I., arXiv:1607.00503 [hep-th], https://arxiv.org/abs/1607.00503].

Построены новые модели SU(2|1) суперсимметричной механики посредством калибрования систем с динамическим (1,4,3) и полу-динамическим (4,4,0) мультиплетами. Предложена новая версия SU(2|1) гармонического суперпространства, позволяющая строить члены типа Весса- Зумино для взаимодействующих (4,4,0) мультиплетов. Новое N=4 суперрасширение многочастичной модели Калоджеро-Мозера построено калиброванием U(n) изометрии в матричной модели SU(2|1) гармонических суперполей. Эти результаты представлены в опубликованной участниками проекта работе [S. Fedoruk, E. Ivanov, JHEP 1611 (2016) 103; arXiv:1610.04202 [hep-th], http://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP11%282016%29103].

Введён новый тип нерелятивистской N=8 суперсимметричной механики, связанной с реализацией на мировой линии супергруппы SU(2|2) , трактуемой как деформация плоской N=8, d=1 суперсимметрии. Различные SU(2|2) суперпространства мировой линии построены как фактор-пространства этой супергруппы и развиты соответствующие суперполевые методы. Для SU(2|2) мультиплетов вне массовой поверхности с составами (3,8,5), (4,8,4) и (5,8,3) построены и изучены наиболее общие суперполевые и компонентные действия. Их общими чертами являются массо-подобные осцилляторные члены, пропорциональные параметру деформации, и тригонометрическая реализация суперконформной группы OSP(4\*|4) в конформных случаях. Для простейшей модели с мультиплетом (5,8,3) проведено квантование. Данные результаты опубликованы в работе [Ivanov E., Lechtenfeld O., Sidorov S., JHEP 1611 (2016) 031; arXiv:1609.00490 [hep-th]; [http://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP11%282016%29031](http://link.springer.com/article/10.1007/JHEP11%282016%29031)].

***на английском языке***

We consider, in the harmonic superspace approach, the six-dimensional N=(1,0) supersymmetric model of abelian gauge multiplet coupled to a hypermultiplet. The background field method is developed, the superficial degree of divergence is evaluated and the structure of possible one-loop divergences is analyzed. Using the superfield proper-time technique and background-field method in six-dimensional N=(1,0) harmonic superspace, we compute the divergent part of the one-loop effective action depending on both the gauge multiplet and the hypermultiplet. The corresponding counterterms contain the purely gauge multiplet contribution together with the mixed contributions of the gauge multiplet and hypermultiplet. We show that the theory is one-loop on-shell finite in the gauge multiplet sector what is in agreement with the known results. The divergences in the mixed sector cannot be eliminated by any field redefinition, implying the theory to be on-shell UV divergent at one loop. These results are presented in the article [Buchbinder I.L., Ivanov E.A., Merzlikin B.S., Stepanyantz K.V., Phys. Lett. 763B (2016) 375; arXiv:1609.00975 [hep-th]; http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269316306311] by the participants of this Project. Also, there was noticed an analogy between the construction of 6D, N=(2,0) superfields in 6D, N=(1,0) harmonic superspace and that of the superfields of 6D vector multiplet in the same superspace.

It was conducted a numerical analysis of the equations for the sum of leading divergences theory for D = 6,8,10 dimensions. The results were compared with perturbation theory and analytical solutions for endless "ladder" amounts in all examined dimensions. Comparison of numerical and analytical solutions has shown that the basic properties of the behavior of the divergences in the theory fully explains the "ladder" solutions. That is, it was numerically shown that the exact solution for endless amounts of divergences of the theory is the same infinite pole decision as "ladders" for the corresponding dimensions of the space. While numerical solution have a proximity for "ladder" solution. These results were published in [Borlakov A.T., Kazakov D.I., Tolkachev D.M., Vlasenko D.E.; arXiv:1610.05549 [hep-th]].

The solution (representation) for tree level S-matrix for external field scattering amplitudes (form factors) was found in terms of Grassmannian integral in N=4 SYM theory (toy model for higher energy QCD). This is interesting and important result from pure theoretical point of view as it allows better understand relation between N=4 SYM and twistor string theories. This result is also important for particle physics applications because obtained analytical results can be used in QCD computations. The results are presented in [Bork L.V., Onishchenko A.I., arXiv:1607.00503 [hep-th], https://arxiv.org/abs/1607.00503].

New models of the SU(2|1) supersymmetric mechanics based on gauging the systems with dynamical (1,4,3) and semi-dynamical (4,4,0) supermultiplets are presented. We propose a new version of SU(2|1) harmonic superspace approach which makes it possible to construct the Wess-Zumino term for interacting (4,4,0) multiplets. A new N=4 extension of d=1 Calogero-Moser multiparticle system is obtained by gauging the U(n) isometry of matrix SU(2|1) harmonic superfield model. These results are presented in the article [S. Fedoruk, E. Ivanov, JHEP 1611 (2016) 103; arXiv:1610.04202 [hep-th], http://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP11%282016%29103] published by the participants of this Project.

We introduce a new kind of non-relativistic N=8 supersymmetric mechanics, associated with worldline realizations of the supergroup SU(2|2) treated as a deformation of flat N=8, d=1 supersymmetry. Various worldline SU(2|2) superspaces are constructed as coset manifolds of this supergroup, and the corresponding superfield techniques are developed. For the off-shell SU(2|2) multiplets (3,8,5), (4,8,4) and (5,8,3), we construct and analyze the most general superfield and component actions. Common features are mass oscillator-type terms proportional to the deformation parameter and a trigonometric realization of the superconformal group OSp(4∗|4) in the conformal cases. For the simplest (5,8,3) model the quantization is performed. These results were published in [Ivanov E., Lechtenfeld O., Sidorov S., JHEP 1611 (2016) 031; arXiv:1609.00490 [hep-th]; [http://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP11%282016%29031](http://link.springer.com/article/10.1007/JHEP11%282016%29031)].

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Борк Л.В., Онищенко А.И. (Bork L.V., Onishchenko A.I.) Grassmannians and form factors with q2=0 in N=4 SYM theory Journal of High Energy Physics (2016);

2. Борлаков А.Т, Казаков Д.И, Толкачев В.М., Власенко Д.Е. (Borlakov A.T. , Kazakov D.I., Tolkachev D.M., . Vlasenko D.E) All-loop Analysis of UV Divergences in Maximally Supersymmetric Gauge Theories Journal of High Energy Physics (2016);

3. Бухбиндер И.Л., Иванов Е.А., Мерзликин Б.С., Степаньянц К.В. (Buchbinder I.L., Ivanov E.A., Merzlikin B.S., Stepanyantz K.V.) One-loop divergences in the 6D, N=(1,0) abelian gauge theory Physics Letters B (2016);

4. Иванов Е.А., Лехтенфельд О., Сидоров С.С. (Ivanov Evgeny, Lechtenfeld Olaf, Sidorov Stepan) SU(2|2) supersymmetric mechanics Journal of High Energy Physics (2016);

5. Федорук С.А., Иванов Е.А. (Fedoruk Sergey, Ivanov Evgeny) Gauged spinning models with deformed supersymmetry Journal of High Energy Physics (2016).

**Год представления отчета**

**2017**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

В рамках произвольной шестимерной N=(1,0) суперсимметричной калибровочной теории, сформулированной в N=(1,0) гармоническом суперпространстве, развит суперполевой метод фонового поля, вычислен индекс расходимости суперграфов и проанализированы возможные контрчлены вне массовой оболочки. Проведено вычисление однопетлевых контрчленов как на основе явно ковариантных методов, так и на основе гармонических суперграфов и выведены offshell однопетлевые расходимости, зависящие от суперполей векторного мультиплета и гипермультеплета. Полученные результаты применены для изучения однопетлевых расходимостей в N=(1,1) неабелевой калибровочной теории. Показано, что хотя рассматриваемая теория не перенормируема по индексу, все однопетлевые расходимости сокращаются без использования уравнений движения. Эти результаты исследований представлены в работах [I.L. Buchbinder, E.A. Ivanov, B.S. Merzlikin, K.V. Stepanyantz, JHEP 1701 (2017) 128, arXiv:1612.03190 [hep-th], https://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP01%282017%29128], [I.L. Buchbinder, E.A. Ivanov, B.S. Merzlikin, K.V. Stepanyantz, Nucl.Phys. B921 (2017) 127, arXiv:1704.02530 [hep-th], http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0550321317301748?via%3Dihub], [E. Ivanov, J. Phys. Conf. Ser. 804 (2017) 012020, arXiv:1610.08902 [hep-th], <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-> 6596/804/1/012020/meta].

В рамках работы по анализу ультрафиолетовых расходимостей в теориях Янга-Миллса в высших размерностях (для случая D=8) была изучена зависимость четырехчастичной амплитуды от схемы вычитания расходимостей. Расчеты выполнялись в рамках размерной регуляризации.

Получены функции суммы бесконечной последовательности выражения для лидирующих и подлидирующих расходимостей во всех порядках теории возмущений для не минимальной схемы вычитания, а также проведено их сравнение на предмет схемной зависимости. Предложено предварительное общее утверждение, что все контрчлены (в D=8 теории супер-Янга-Миллса) выражаются через члены более высокого порядка расходимости (через производные определенного порядка). Это в свою очередь означает, что подход перенормировки константы связи работает и в случае с неперенормируемыми теориями, при этом перенормировки подлежит не отдельный порядок теории возмущений, а сразу вся бесконечная последовательность вкладов теории возмущений определенного порядка расходимости. Эти результаты опубликованы в работе [A.T. Borlakov, D.I. Kazakov, D.M. Tolkachev, D.E. Vlasenko, arXiv:1712.04348 [hep-th] , https://arxiv.org/abs/1712.04348].

Проведено исследование амплитуд рассеяния в максимально суперсимметричной теории Янга-Миллса – модельной теории, которая качественно описывает высокоэнергетическое поведение КХД. Данное исследование позволило для случая амплитуд рассеяния при высоких энергиях (форм-факторов операторов вильсоновских линий) получить точное решение для «древесной» S-матрицы теории в виде интеграла по грассманиану. Этот результат важен как с чисто теоретической точки зрения для лучшего понимания связи максимально суперсимметричной теории Янга-Миллса с твисторными теориями струн, так и для физики элементарных частиц, для использования полученных аналитических результатов в КХД расчётах. Результаты представлены в работах [L.V. Bork, A.I. Onishchenko, JHEP 1705 (2017) 040, arXiv:1610.09693 [hep-th], https://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP05%282017%29040], [L.V. Bork, A.I. Onishchenko, Phys.Lett. B774 (2017) 403, arXiv:1704.00611 [hep-th], http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269317306925?via%3Dihub].

Выполнено квантование одночастичной модели SU(2|1) суперсимметричной многочастичной механики с дополнительными полудинамическими спиновыми степенями свободы. Найден соответствующий энергетический спектр и построен полный набор физических состояний как функций параметра массовой деформации m и SU(2) спина q. Показано, что состояния на фиксированном уровне энергии образуют неприводимые мультиплеты супергруппы SU(2|1). Кроме того, показано наличие в модели скрытой суперконформной симметрии OSp(4|2) в классическом и квантовом случаях. Вычислены операторы Казимира OSp(4|2) и показано, что полный набор физических состояний, принадлежащих разным уровням энергии при фиксированном q, объеденены в неприводимый мультиплет OSp(4|2). Изучены киральные SU(2|1) суперполя с s внешними индексами подгруппы SU(2), которые описывают N=4 деформированные мультиплеты с расширенным набором полей (2(2s+1),4(2s+1),2(2s+1)). Показано, что расщепление расширенного мультиплета на N=2, d=1 мультиплеты содержат так называемые «длинные» неразложимые N=2, d=1 мультиплеты (2, 4, 2). Эти результаты опубликованы в работах [E. Ivanov, A. Rivasplata, S. Sidorov, J. Phys. Conf. Ser. 804 (2017) 012021, arXiv:1610.03961 [hep-th], http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/804/1/012021/meta], [S. Fedoruk, E. Ivanov, S. Sidorov, arXiv:1710.02130 [hep-th], <https://arxiv.org/abs/1710.02130>].

***на английском языке***

Within the framework of an arbitrary six-dimensional N=(1,0) supersymmetric gauge theory formulated in the N=(1,0) harmonic superspace, the superfield field background method is developed, superficial degree of divergences is found and possible off-shell counterterms are analyzed. One-loop counterterms are calculated both on the basis of explicitly covariant methods and using of harmonic supergraphs technique. Off-shell one-loop divergences are calculated and depend on vector multiple and the hypermultiplet superfields. The obtained results are used to study one-loop divergences in N=(1,1) non- Abelian gauge theory. It is shown that, despite the fact that the theory under consideration is not renormalizable by the index, all one-loop divergences are reduced without using the equations of motion.

The results of the studies are presented in the works [I.L. Buchbinder, E.A. Ivanov, B.S. Merzlikin, K.V. Stepanyantz, JHEP 1701 (2017) 128, arXiv:1612.03190 [hep-th],

https://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP01%282017%29128], [I.L. Buchbinder, E.A. Ivanov, B.S. Merzlikin, K.V. Stepanyantz, Nucl. Phys. B921 (2017) 127, arXiv:1704.02530 [hep-th], http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0550321317301748?via%3Dihub], [E. Ivanov, J. Phys. Conf. Ser. 804 (2017) 012020, arXiv:1610.08902 [hep-th], <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-> 6596/804/1/012020/meta].

In the work on the analysis of ultraviolet divergences in the Yang-Mills theories in higher dimensions (for the case D=8), the dependence of the 4-particle amplitude on the subtraction scheme was studied. All the calculations were performed in the dimensional regularization. The functions of the sum of infinite sequence for leading and subleading divergences in all orders of perturbation theory were obtained for a non-minimal subtraction scheme, and a comparison was made for the subtraction scheme dependence.

This dependence in all orders of perturbation theory is determined by one arbitrary constant, which is contained in the subtraction of a one-loop diagram of the "box" type. We make a preliminary general statement that all counterterms (in the theory D=8 SYM) are expressed in terms of higher order divergence (via derivatives of a certain order). This in turn means that the renormalisation coupling constants approach also work in the case of nonrenormalizable theories, only with a crucial correction, the subject to renormalization is not a certain order of PT, but, the entire infinite sequence of PT of certain order. These results are presented in the paper [A.T. Borlakov, D.I. Kazakov, D.M. Tolkachev, D.E. Vlasenko, arXiv:1712.04348 [hep-th] , <https://arxiv.org/abs/1712.04348>]. In N=4 SYM theory (toy model for higher energy QCD) the solution for tree level scattering amplitudes with arbitrary number of particles at high energies (Wilson line form factors and correlation functions) was obtained. The solution is represented as integral over Grassmannian. This is interesting and important result from pure theoretical point of view as it allows better understand relation between N=4 SYM and twistor string theories. This result is also important for particle physics applications because obtained analytical results can be used in QCD computations. The results are presented in the papers [L.V. Bork, A.I. Onishchenko, JHEP 1705 (2017) 040, arXiv:1610.09693 [hep-th], https://link.springer.com/article/10.1007%2FJHEP05%282017%29040], [L.V. Bork, A.I. Onishchenko, Phys.Lett. B774 (2017) 403, arXiv:1704.00611 [hep-th], http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269317306925?via%3Dihub].

We quantize the one-particle model of the SU(2|1) supersymmetric multi-particle mechanics with the additional semi-dynamical spin degrees of freedom. We find the relevant energy spectrum and the full set of physical states as functions of the mass-dimension deformation parameter m and SU(2) spin q. It is found that the states at the fixed energy level form irreducible multiplets of the supergroup SU(2|1). Also, the hidden superconformal symmetry OSp(4|2) of the model is revealed in the classical and quantum cases. We calculate the OSp(4|2) Casimir operators and demonstrate that the full set of the physical states belonging to different energy levels at fixed q are unified into an irreducible OSp(4|2) multiplet. We study SU(2|1) chiral superfields with s external indices of the subgroup SU(2), which describe N=4

deformed multiplets with an extended set of fields (2(2s+1), 4(2s+1), 2(2s+1 )). It is shown that their splitting into N=2, d=1 multiplets contains the so-called "long" indecomposable N=2, d=1 multiplets (2 4, 2). These results are presented in the papers [E. Ivanov, A. Rivasplata, S. Sidorov, J. Phys. Conf. Ser. 804 (2017) 012021, arXiv:1610.03961 [hep-th], http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/804/1/012021/meta], [S. Fedoruk, E. Ivanov, S. Sidorov, arXiv:1710.02130 [hep-th], <https://arxiv.org/abs/1710.02130>].

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Борк Л.В., Онищенко А.И. (Bork L.V., Onishchenko A.I.)

Ambitwistor strings and reggeon amplitudes in N=4 SYM Physics Letters B (2017 г.)

2. Борк Л.В., Онищенко А.И. (Bork L.V., Onishchenko A.I.)

Grassmannian integral for general gauge invariant off-shell amplitudes in N=4 SYM Journal of High Energy Physics (2017 г.)

3. Бухбиндер И.Л., Иванов Е.А., Мерзликин Б.С., Степаньянц К.В. (Buchbinder I.L., Ivanov E.A., Merzlikin B.S., Stepanyantz K.V.)

One-loop divergences in 6D, N=(1,0) SYM theory Journal of High Energy Physics (2017 г.)

4. Бухбиндер И.Л., Иванов Е.А., Мерзликин Б.С., Степаньянц К.В. (Buchbinder I.L., Ivanov E.A., Merzlikin B.S., Stepanyantz K.V.)

Supergraph analysis of the one-loop divergences in 6D, N=(1,0) and N=(1,1) gauge theories Nuclear Physics B (2017 г.)

5. Иванов Е.А. (Ivanov Evgeny)

Off- and on-shell harmonic superspaces for 6D SYM theories Journal of Physics: Conference Series (2017 г.)

6. Иванов Е.А., Ривасплата Мендоза А., Сидоров С.С. (Ivanov Evgeny, Rivasplata Mendoza Antonio, Sidorov Stepan)

Long N=2, 4 multiplets in supersymmetric mechanics Journal of Physics: Conference Series (2017 г.)

7. Федорук С.А., Иванов Е.А., Сидоров С.С. (Fedoruk Sergey, Ivanov Evgeny, Sidorov Stepan)

Deformed supersymmetric quantum mechanics with spin variables Journal of High Energy Physics (2017 г.)

**ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ**

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**17-12-01540**

Руководитель проекта

**Авдеев Михаил Васильевич**

Название проекта

Мониторинг и изучение мезоскопических структур на планарных и развитых электрохимических интерфейсах для литиевых источников питания методами рассеяния нейтронов

Вид конкурса

Конкурс 2017 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2017–2019**

**Год представления отчета**

**2017**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

1. Рассмотрены возможности оптимизации структуры «подложка/металлический электрод/жидкий электролит» в отношении максимального изменения кривых зеркального отражения в экспериментах по нейтронной рефлектометрии на электрохимической границе раздела между металлическим электродом и жидким электролитом, содержащим ионы Li+, в процессе функционирования. Выделены и проанализированы характерные соотношения между плотностями длины рассеяния компонент, для которых кривые отражения наиболее полным образом передают информацию о структуре переходного слоя твердого электролита, формирующегося на поверхности электрода в ходе разрядки. Экспериментально исследована чувствительность вариации контраста в нейтронной рефлектометрии зеркального отражения к образованию слоя твердого электролита (SEI) на поверхности металлического электрода (медь на кремнии) посредством использования изотопного замещения водород-дейтерий в жидкой основе электролита. Эксперименты проведены со специализированной ячейкой, разработанной и адаптированной для исследований структурных изменений на электрохимических границах между твердыми электродами и жидкими электролитами в режиме operando, на времяпролетном рефлектометре ГРЭИНС импульсного реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна), http://flnph.jinr.ru/ru/facilities/ibr-2/instruments/grains. Диапазон по перпендикулярной к поверхности составляющей вектора рассеяния, охватываемый в эксперименте, достаточен для достоверного заключения о появлении нового слоя (толщина свыше 4 нм) при использовании полностью дейтерированного жидкого компонента в электролите. Получены указания на зависимость рассеивающей плотности слоя SEI от рассеивающей плотности электролита, что свидетельствует о проникновении электролита в структуру SEI.

2. Исследована чувствительность метода нейтронной рефлектометрии к образованию на электрохимических границах раздела литийсодержащих слоев, осажденных из разных электролитов. In situ эксперименты проведены на времяпролетном рефлектометре ГРЭИНС импульсного реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна). Анализировались различия в эволюции литиевого слоя, образующегося поверх первичного слоя SEI. Использование оптимального соотношения между рассеивающими плотностями подложки, электрода и жидкого электролита (использование полностью дейтерированного жидкого компонента) позволило определить, что слой SEI в основном состоит из соединений с высоким содержанием лития (в частности оксид лития). Из анализа кривых зеркального отражения нейтронов вместе с диффузным рассеянием следует, что осаждение лития поверх слоя SEI происходит в два этапа: формирование плотного слоя с постепенным изменением структурных параметров (толщина, шероховатость, рассеивающая плотность); формирование диффузионного перехода с понижением содержания лития к периферии, что можно связать с формированием сильно неоднородных структур (как, например, игольчатые структуры) на поверхности электрода. Образование слоя твердого электролита и последующие процессы осаждения лития чувствительны к наличию в электролите неэлектроактивных добавок (в частности ТБАП). Так, наблюдено подавление роста поверх SEI первичного слоя лития.

3. Результаты нейтронной рефлектометрии дополнены анализом данных различных видов микроскопии и профиломитрии, позволяющих связать наблюдения структурных изменений поверхности на наноуровне с субмикронным и микронным уровнями. Эксперименты проводились на приборной базе МГУ (Москва) и Государственного университета «Дубна» (Дубна). Параметры из атомно-силовой микроскопии и сканирующей туннельной микроскопии хорошо согласуются с аналогичными значениями, полученными из нейтронной рефлектометрии. Таким образом, можно заключить, что профили плотности длин рассеяния, получаемые из нейтронной рефлектометрии, соответствуют реальным физическим величинам. Оптическая микроскопия показывает, что при достаточно длительном электроосаждении лития на металлический электрод формируются игольчатые структуры толщиной порядка 1 мкм. Это затрудняет изучение электроосаждения лития при помощи in situ сканирующей зондовой микроскопии, однако нейтронная рефлектометрия позволяет давать некоторую количественную оценку морфологии данных образований. Так, слабое изменение рассеивающей плотности при электроосаждении лития, наблюдаемое в нейтронной рефлектометрии уже на начальном этапе, согласуется с тем фактом, что литий на макроуровне осаждается в виде игольчатых структур, которые растут преимущественно в длину при практически постоянной толщине.

4. С помощью малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) проведен анализ материалов для литий-кислородной ячейки по исследованию электрохимического осаждения пероксида лития в пористых электродах в режиме реального времени. На малоугловой установке ЮМО импульсного реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна), http://flnph.jinr.ru/ru/facilities/ibr-2/instruments/yumo, измерены кривые рассеяния на возможных компонентах такой ячейки, включая электродные материалы (углерод как рабочий электрод, литиевая фольга как противоэлектрод), полимерные сепараторы и проводящие керамические мембраны. Исходя из полученных результатов выбраны компоненты, позволяющие регистрировать изменения в кривых малоуглового рассеяния при осаждении пероксида лития в пористой структуре углеродного электрода. Показана принципиальная возможность подбора компонент литий-кислородной ячейки для in situ исследований малоуглового рассеяния нейтронов. Проведена оптимизация состава и структуры проводящей керамические мембраны для данной ячейки. Важным аспектом явилось изучение условий синтеза, позволяющих добиться однородности материала и его достаточной ионной проводимости. Исходя из доступности и возможностей синтеза за основу было взято соединение LAGP типа NASICON, в которое для усиления ионной проводимости (до 5 раз) добавлялось соединение иттрия (Y2O3). Кристаллизация с помощью двойного отжига показывает различия в формировании фаз без и с добавлением иттриевого соединения, определяющие различные сигналы малоуглового рассеяния.

5. Малоугловое рассеяние нейтронов (ex-situ измерения на установке ЮМО импульсного реактора ИБР-2, ОИЯИ, Дубна) использовано для определения относительной доли заполненных пор в литий-кислородной ячейке на уровне 1-100 нм при смачивании углеродного электрода (углеродная бумага с сажей SIGRACET) жидким электролитом на основе апротонного растворителя (ДМСО). Для «затемнения» углеродной матрицы использовался полностью дейтерированный растворитель в электролите. Проведено сравнение разрядов с электролитами для разного содержания воды при

разных токах разряда. Оценка доли заполненных пор проводилась из анализа роста малоуглового рассеяния за счет осаждения и заполнения пор пероксидом лития после разряда. Показано, что при использовании в качестве жидкого компонента электролита ДМСО доля малых пор, в которых после разряда оседает пероксид лития, слабо зависит от тока разряда. Однако данная характеристика существенным образом зависит от остаточного содержания воды в электролите и может меняется от 10 до 50 %. Полученные структурные данные объясняют поведение макроскопических характеристик системы, связанное с повышением электрохимической емкости при увеличении доли остаточной влаги в электролите.

***на английском языке***

1. The possibilities of the optimization of the ‘substrate/metal electrode/liquid electrolyte’ structure with respect to the maximum change in specular reflectivity curves in neutron reflectometry experiments with electrochemical interfaces between metal electrodes and liquid electrolytes containing Li+ ions in the process of functioning, have been considered. The characteristic relations between the scattering length densities of the components for which the reflectivity curves most completely transfer information on the structure of a transition layer of the solid electrolyte interphase (SEI) formed on the surface of the electrode during the discharge, have been identified and analyzed. The sensitivity of the contrast variation in specular neutron reflectometry to the SEI formation on the surface of a metal electrode (copper on silicon) by using hydrogen/deuterium isotope substitution in a liquid electrolyte has been experimentally studied. The experiments were carried out with a specialized cell developed and adapted to investigate structural changes on the electrochemical boundaries between solid electrodes and liquid electrolytes in the operando mode at the GRAINS time-of-flight reflectometer at the IBR-2 pulsed reactor (JINR, Dubna), http://flnph.jinr.ru/en/facilities/ibr-2/instruments/grains. The range over the scattering vector (component perpendicular to the surface) covered in the experiment is sufficient for the reliable conclusion about the appearance of a new layer (thickness above 4 nm) using a fully deuterated liquid component in the electrolyte. The indications have been obtained for the dependence of the scattering density of the SEI layer on the scattering density of the electrolyte, which points out to the penetration of the electrolyte into the SEI structure.

2. The sensitivity of neutron reflectometry to the formation of lithium-containing layers deposited from different electrolytes on the electrochemical interfaces has been experimentally investigated. In situ experiments were carried out on the GRAINS time-of-flight reflectometer at the IBR-2 pulsed reactor (JINR, Dubna). Differences in the evolution of the lithium layer formed over the primary SEI layer have been analyzed. Using the optimal ratio between the scattering densities of the substrate, electrode and liquid electrolyte (with a fully deuterated liquid component), it was possible to determine that the SEI layer mainly consists of compounds with high lithium content (such as lithium oxide). From the analysis of the specular reflectivity curves and diffuse scattering of neutrons, it follows that the deposition of lithium on top of the SEI layer occurs in two stages: the formation of a dense layer with a gradual change in structural parameters (thickness, roughness, scattering density); the formation of a diffusion transition with a decrease in the lithium content to the periphery, which can be associated with the formation of highly heterogeneous structures (such as needle structures) on the electrode surface. The formation of a solid electrolyte layer and subsequent lithium deposition processes are sensitive to the presence of nonelectroactive additives (in particular, TBAP) in the electrolyte. Thus, the suppression of the growth of the primary lithium layer on SEI was observed.

3. The results of neutron reflectometry have been supplemented by the analysis of data from various types of microscopy and profilometry, which allowed one to relate the observations of structural changes on the surface at nanoscale with those at submicron and micron levels. The experiments were carried out on the instruments at the Moscow State University (Moscow) and the State University ‘Dubna’ (Dubna). Parameters from atomic force microscopy and scanning tunneling microscopy are in good agreement with similar values obtained from neutron reflectometry. Thus, it can be concluded that the scattering length density profiles obtained from neutron reflectometry describe well real physical quantities. Optical microscopy shows that when the electrodeposition of lithium is sufficiently prolonged, needle-type structures with a thickness of the order of 1 μm are formed on the metal electrode. This makes it difficult to study lithium electrodeposition by in situ scanning probe microscopy, but neutron reflectometry allows some quantitative evaluation of the morphology of these formations. Thus, a slight change in the scattering density during lithium electrodeposition, observed in neutron reflectometry at the early stages, is consistent with the fact that lithium is deposited at the macro level in the form of acicular structures that grow predominantly in length at practically constant thickness.

4. Using small-angle neutron scattering (SANS), materials for a lithium-oxygen cell have been analyzed for studying electrochemical depositions of lithium peroxide in porous electrodes in real time. Experiments were carried out on the YuMO small-angle instrument at the IBR-2 pulsed reactor (JINR, Dubna), http://flnph.jinr.ru/en/facilities/ibr-2/instruments/yumo. The SANS curves have been obtained for possible components of such a cell, including electrode materials (carbon as a working electrode), lithium foil (as a counter electrode), polymer separators and conductive ceramic membranes. Based on the results obtained, the components have been selected that allow one to observe and analyze changes in small-angle scattering curves upon precipitation of lithium peroxide in the porous structure of the carbon electrode. The principal possibility of selecting the components of a lithium-oxygen cell for in situ studies of small-angle neutron scattering has been shown. The composition and structure of the conducting ceramic membrane for this cell have been optimized. An important aspect was the study of synthesis conditions, which made it possible to achieve homogeneity of the material together with high ionic conductivity. Based on the availability and possibilities of the synthesis, the LAGP compound of the NASICON type was used, in which an yttrium compound (Y2O3) had been added to enhance (up to 5 times) the ionic conductivity of the ceramics. Crystallization with double annealing shows differences in the formation of the phases without and with the yttrium addition, which determines various small-angle scattering signals.

5. Small-angle neutron scattering (ex-situ measurements at the YuMO small-angle instrument at the IBR-2 pulsed reactor, JINR, Dubna) have been used to determine the relative fraction of filled pores in a lithium-oxygen cell at a level of 1-100 nm when wetting a carbon electrode (carbon paper with carbon black SIGRACET) with a liquid electrolyte based on an aprotic solvent (DMSO). To "darken" the carbon matrix, the fully deuterated solvent in the electrolyte was used. The discharges with electrolytes with different water content at different discharge currents have been compared. The fraction of the filled pores was estimated from the analysis of the growth of small-angle scattering due to the deposition and filling of the pores with lithium peroxide after discharge. It has been shown that when the DMSO-based electrolyte is used, the fraction of small pores in which lithium peroxide is deposited after the discharge is slightly dependent on the discharge current. However, this characteristic strongly depends on the residual water content in the electrolyte and can vary from 10 to 50%. The obtained structural data explain the behavior of the macroscopic characteristics of the system associated with an increase in the electrochemical capacity with an increase in the residual moisture in the electrolyte.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

*1. Петренко В.И., Гапон И.В., Рулев А.А., Ушакова Е.Е., Катаев Е.Ю., Яшина Л.В., Иткис Д.М., Авдеев М.В. (Petrenko V.I., Gapon I.V., Rulev A.A., Ushakova E.E., Kataev E.Yu., Yashina L.V., Itkis D.M., Avdeev M.V.)*

Studies of electrochemical interfaces by TOF neutron reflectometry at the IBR-2 reactor. Journal of Physics: Conference Series (2018 г.)

*2. Петренко В.И., Косячкин Е.Н., Булавин Л.А., Авдеев М.В. (Petrenko V.I., Kosyachkin Ye.N., Bulavin L.A., Avdeev M.V.)*

On the enchancment of the effect of adsorption layer at the inteface ‘metal electrode - liquid electrolyte’ in experiments on specular neutron reflectometry. The Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques (2018 г.)

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**14-12-00516**

Руководитель проекта

**Киселев Михаил Алексеевич**

Название проекта

Развитие методов малоуглового рассеяния и исследование везикул и нанолекарств на нейтронных и синхротронных источниках

Вид конкурса

Конкурс 2014 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2014–2016**

**Проект продлен до 2018 года**

**Год представления отчета**

**2014**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Полученные в 2014 году результаты по исследованию самосборки липидных мембран в смешанной системе димиристоилфосфатидилхолин / холат натрия с концентрацией компонент 7.5 мМ/ 4.5 мМ позволили сформулировать последовательность морфологических преобразований, происходящих при увеличении температуры от 10*0*C до 60*0*C: липидный бислой (везикулярное состояние), гауссов клубок из лентоподобных структур (мицеллярное состояние), стержнеобразная мицелла (мицеллярное состояние), гауссов клубок из лентоподобных структур (мицеллярное состояние), липидный бислой (везикулярное состояние). Последовательность полностью обратима относительно изменения температуры.

Результаты исследования методом малоуглового рассеяния нейтронов мембран, моделирующих липидную матрицу верхнего слоя кожи млекопитающих Stratum Corneum (смесь церамид / холестерин / жирная кислота с весовым соотношением компонент 55/25/20) демонстрируют зависимость пористости мембраны от типа церамида. Мембраны, построенные на основе церамидов [NS], [NP] и [AS] имеют гладкую связанную поверхность. Мембраны, построенные на основе церамида [AP] имеют пористую структуру и должны быть более проницаемы для воды и лекарств. Полученный результат является принципиально новым и не может быть получен в дифракционных нейтронных экспериментах.

Важным научным результатом в исследованиях однослойных везикул димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ) методом малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей является существенное уменьшение толщины липидного бислоя ДМФХ при увеличении концентрации сахарозы. Толщина липидного бислоя ДМФХ уменьшается на 1.50±0.1 нм при увеличении концентрации сахарозы в воде от 0% до 40%. Главным методическим результатом проведенных исследований является необходимость учета флуктуаций положения молекул ДМФХ в липидном бислое для успешного описания экспериментального спектра малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения. Развитый авторами проекта подход для описания кривых малоуглового рассеяния рентгеновских лучей от везикулярных систем является на сегодня наиболее прецизионным подходом в мире для получения новой уникальной информации о структуре везикул на синхротронных источниках.

Показана экспериментальная возможность измерения на установке ДИКСИ синхротронного источника КИСИ в НИЦ «Курчатовский институт» спектров малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения от фосфолипидной транспортной наносистемы (ФТНС) и нанолекарств на её основе. Принципиальным результатом здесь является доказательство того, что как ФТНС, так и нанолекарства на её основе имеют везикулярную, а не мицеллярную морфологию. Методами динамического рассеяния света такой результат не может быть получен.

***на английском языке***

Results, obtained in 2014 in the investigation of membrane self-assembly for the case of mixed system dimyristoylphosphatidylcholane / sodium cholate with component concentration 7.5 mМ/ 4.5 mМ, allows one to formulate the sequence of the morphological transformation at the temperature increase from 10oC to 60oC: lipid bilayer (vesicular state), gaussian coil from ribbon-like structure (micellar state), rod-like micelles (micellar state), gaussian coil from ribbon-like structure (micellar state), and lipid bilayer (vesicular state).

Results, obtained by small-angle neutron scattering from the model lipid membrane of the outermost layer of the skin Stratum Corneum (mixed system ceramide / cholesterol / fatty acid with component ratio 55/25/20 (w/w)), shows the dependence of the membrane porosity on the type of ceramide molecules. Membranes based on the ceramides [NS], [NP], and [AS] have smooth and connected surface. Membranes based on the ceramides [AP] have porous structure and should be more permeable for water and drugs. This result is original and cannot be obtained in the diffraction experiment.

Important result has been obtained by complementary neutron and X-ray small-angle scattering on the unilamellar vesicles from dimyristoylphosphatidylcholane (DMPC) in sucrose solutions. DMPC membrane thickness decrease on 1.50±0.1 nm at increase of sucrose concentration in water from 0% to 40% (w/w). Main methodological result is necessity to take into account the fluctuation of the position of DMPC molecules in the bilayer for the correct fitting of the experimental curve in small-angle X-ray scattering experiment at synchrotron (SAXS). For today, the approach developed by the project authors for the description of SAXS experimental curves on the vesicular systems is more precise in the world and allows one to obtained unique information about vesicle structure at synchrotron source.

The possibility to acquire the experimental spectra from the phospholipid transport nanosystem (FTNS) and from the nanodrugs based on the FTNS has been demonstrated experimentally at the baseline DICSI of KISI synchrotron source at NIC «Kurchatov Institute». It was proved that as FTNS, as the nanodrugs based on the FTNS possess the vesicular morphology, but not the micellar morphology. This result has a principal sense and cannot be obtained by dynamic light scattering.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Киселев М.А.

Возможности малоуглового нейтронного и синхротронного рассеяния для исследования везикулярных переносчиков лекарств Совещание и Молодежная конференция по использованию рассеяния нейтронов и синхротронного излучения в конденсированных средах. Сборник тезисов. 27-31 октября 2014, Санкт-Петербург (2014);

2. Киселев М.А.

Методы исследования липидных наноструктур на нейтронных и синхротронных источниках. Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (2014);

3. Киселев М.А., Земляная Е.В., Жабицкая Е.И., Аксенов. В.Л. Исследование однослойных везикул ДМФХ в водных растворах сахарозы методами малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. Кристаллография (2015).

**Год представления отчета**

**2015**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Проведены эксперименты методом малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения по определению структуры фосфолипидной транспортной наносистемы (ФТНС) на синхротронном источнике КИСИ, НИЦ «Курчатовский институт». Разработан метод описания спектров малоуглового рассеяния от везикулярных систем на основе алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции. Показано, что в интервале весовых концентраций ФТНС в воде от 26% до 37% ФТНС является везикулярной системой и расчетная кривая полностью описывает экспериментальный спектр. Полное описание экспериментальной кривой рассеяния позволило определить параметры везикулярной популяции (радиус везикулы, полидисперсность радиуса, толщина липидного бислоя, толщина гидрофобной части липидного бислоя, толщина области полярных голов) как функции концентрации ФТНС. При увеличении концентрации ФТНС от 25% до 37% происходит уменьшение радиуса везикул ФТНС от 205 ангстрем до 148 ангстрем и уменьшение толщины липидного бислоя от 53 ангстрем до 47 ангстрем. В Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна) на импульсном реакторе ИБР-2 проведены методом малоуглового рассеяния нейтронов эксперименты по определению структуры следующих нанолекарств: фосфолипидная транспортная наносистема, индолип, доксолип, фосфолиповит, наноарбидол, при их концентрации в тяжелой воде 5%, 10%, 15%. Как показывают расчеты, все наночастицы имеют везикулярную морфологию. Фосфолипидная транспортная система и индолип являются малыми везикулами с радиусом в интервале от 150 до 200 ангстрем и толщиной бислоя около 50 ангстрем. Доксолип, фосфолиповит и наноарбидол также являются везикулами, но с радиусом 50-80 ангстрем и толщиной липидного бислоя 30-40 ангстрем. Такие наночастицы следует назвать критически малыми везикулами. Деление нанолекарств на малые везикулы, способные транспортировать водорастворимые и водонерастворимые лекарства, и на критически малые везикулы, способные транспортировать только водонерастворимые лекарства, является главным результатом 2015 года.

***на английском языке***

Small-angle X-ray scattering experiments have been carried out at synchrotron KSSR of the NRC "Kurchatov Institute" for the characterization of the phospholipid transport nanosystem (FTNS). The method based on the algorithm of the Asynchronous Differential Evolution was developed for the description of the small-angle spectra from the vesicular systems. It was proved that FTNS solution in water is vesicular system at the concentration range from 26% to 37% (w/w). The fitted curves are completely describe the experimental curves at this concentration range. Full description of the experimental spectrum has allowed to determine the parameters of the vesicular population (vesicle radius, radius polydispersity, bilayer thickness, thickness of the hydrophobic region of the bilayer, thickness of the polar headgroup region) as function of the FTNS concentration in water. Vesicle radius and bilayer thickness decreases from 205 Angstrom to 148 Angstrom and from 53 Angstrom to 47 Angstrom, respectively, at increasing of FTNS concentration in water from 25% to 37% (w/w). Small-angle neutron scattering experiments have been carried out at pulse reactor IBR-2 (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna) to characterize the structure of the nanodrugs: phospholipid transport nanosystem, indolip, doksolip, phospholipovit, nanoarbidol, at the concentration of nanodrugs in the heavy water 5%, 10%, 15% (w/w). The analysis of the experimental spectra demonstrates that all nanoparticles have vesicular morphology. Phospholipid transport nanosystem and indolip are small unilamellar vesicles (ULVs) with radius 150 - 200 Angstrom and bilayer thickness about 50 Angstrom. Doksolip, phospholipovit, and nanoarbidol are vesicles too, but their radius is 50-80 Angstrom and bilayer thickness is 30-40 Angstrom. We named such nanoparticles as critical ULVs. The main results of 2015 year is subdivision of the nanodrugs on the small ULVs (container for water soluble and unsoluble drugs) and critical ULVs (container only for water unsoluble drugs).

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Lombardo D., Kiselev M., Magazu S., Calandra P.

Amphiphiles Selfassembly: Basic Concepts and Future Perspectives of Supramolecular Approaches. Advances in Condensed Matter Physics (2015) WOS;

2. Zhabitskay E., Zemlyanaya E., Kiselev M., Gruzinov A.

Parallel Asynchronous Differential Evolution Method as a Tool to Analyze Synchrotron Scattering Experimental Data from Vesicular Systems. EPJ Web of Conferences (2015) SCOPUS;

3.  Kiselev M.A., Zemlyanaya E.V., Zhabitskaya E.I., Aksenov V.L.

Investigation of the Structure of Unilamellar Dimyristoylphosphatidylcholine Vesicles in Aqueous Sucrose Solutions by Small Angle Neutron and X-Ray Scattering. Crystallography Report. (2015) WOS SCOPUS;

4. Kiselev M.A., Zemlyanaya E.V., Ipatov O.M., Gruzinov A.Yu., Ermakova E.V., Zabelin A.V., Zhabitskaya E.I., Druzhilovskaya O.S., Aksenov V.L.

Application of small-angle X-ray scattering to the characterization and quantification of the drug transport nanosystem based on the soybean phosphatidylcholine. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis (2015) WOS SCOPUS;

5. Жабицкая Е.И., Земляная Е.В., Киселев М.А.

Численный анализ данных МУРР на везикулярных системах методом асинхронной дифференциальной эволюции. Математическое моделирование (2015) РИНЦ.

**Год представления отчета**

**2016**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Методом малоуглового расеяния нейтронов и рентгеновского синхротронного излучения были проведены исследования структуры нанолекарств (доксолип, индолип, фосфоглив, наноарбидол) и их переносчиков, построенных на основе соевых фосфолипидов (фосфолипидная транспортная наносистема и фосфолиповит). Разработка нанолекарств ведется в Институте биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича. Экспериментальные исследования методом малоуглового рассеяния нейтронов проводились в Объединенном институте ядерных исследований г. Дубна на импульсном реакторе ИБР-2 и методом малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения на синхротроне КИСИ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт». Использовались различные методы и модели для описания экспериментальных спектров и получения информации о структуре нанолекарств. Проведены работы по развитию спектрометра ДИКСИ в НИЦ «Курчатовский институт» и по развитию методов расчета кривых малоуглового рассеяния.

В рамках метода асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ) предложена новая адаптивная схема для операции кроссовера, которая в совокупности со встроенной адаптивной схемой выбора масштабирующего фактора и процедурой рестарта с автоматическим увеличением размера популяции обеспечивает эффективный поиск глобального минимума без подстройки параметров пользователем. С использованием АДЭ, на основе двухступенчатого приближения для плотности длины рассеяния фотона в направлении нормали бислоя рассчитаны параметры липидного бислоя (толщина бислоя, толщина области полярных голов, толщина областей метиленовых и метильных групп) фосфолипидной транспортной наносистемы (ФТНС). Главным компонентом ФТНС являются соевые фосфолипиды (смесь 6 различных насыщенных и ненасыщенных фосфолипидов). Важным результатом, полученным из синхротронных экспериментов, является определение толщины области полярных групп. Для концентраций ФТНС от 25% до 50% увеличение радиуса кривизны липидного бислоя не приводит к существенному увеличению толщины области полярных голов - толщина области полярных голов находится в интервале значений от 8 Å до 10 Å. Использование гидрофобно-гидрофильного приближения для описания плотности распределения длины рассеяния нейтрона позволило определить толщину гидрофильной области ФТНС 5.0±0.5 Å, что демонстрирует высокую проницаемость липидного бислоя ФТНС для воды. Данный результат требует дальнейшего уточнения и проверки, в том числе – с использованием расчетов на основе полной модели. Сформулировано понятие критически малых везикул, как везикул, у которых внутренний радиус соизмерим с толщиной липидного бислоя (внутренний радиус превышает толщину бислоя не более чем в 2 раза). Результаты нейтронных и синхротронных экспериментов демонстрируют, что критически малые везикулы нанолекарств (доксолип, фосфолиповит, наноарбидол) обладают поверхностным зарядом в области фармацевтических концентраций. Молекулы мальтозы обеспечивают химическую и стерическую стабильность нанолекарств.

Важным результатом проекта является экспериментальное доказательство возможности определения параметров нанолекарств в диапазоне весовых концентраций в воде от 5 % до 50%.

Показана эффективность применения нейтронного и синхротронного излучения как взаимодополняющих методов. Структура нанолекарств хорошо определяется методом малоуглового рассеяния нейтронов при их концентрации в тяжелой воде от 5% до 25%. Начиная с 25%-й концентрации нанолекарств в воде, становится эффективным применение малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения. Фармацевтическая концентрация нанолекарства 25% может характеризоваться как рассеянием нейтронов, так и рассеянием рентгеновских лучей, что позволяет получать больше информации о структуре.

***на английском языке***

Structural characterization of the nanodrugs (doksolip, indolip, phosphogliv, nanoarbidol) and their carriers (phospholipid transport nanosystem, phospholipovit) based on the soybean phospholipids was carried out by small-angle neutron and X-ray scattering. Nanodrugs were developed in the Orehovich Institute of Biomedical Chemistry. Experimental study was done in the Joint Institute of Nuclear Research (Dubna) via small-angle neutron scattering (SANS) at pulse neutron source IBR-2 reactor and via smallangle X-ray scattering (SAXS) at synchrotron KISI of the National Research Center «Kurchatov Institute».

Different methods and models were used to fit experimental spectra and obtain information about structure of the nanodrugs.

Development of the DIKSI spectrometer at NRC «Kurchatov Institute» and development of fitting methods for small-angle scattering were carried out. The Asynchronous Differential Evolution method (ADE) has been supplied with new adaptive procedure of calculation of the crossover parameter. This modification, together with adaptive algorithm of scaling factor and the automatic restart, provides the automatic tuning of ADE parameters and significantly increases effectiveness and stability of the ADE-based global minimization process. Lipid bilayer parameters (bilayer thickness, thickness of the polar head region, thicknesses of the methyl and methylene groups) of the phospholipid transport nanosystem (FTNS) were evaluated, by means of the ADE-minimization, on the basis of the two-step approximation for the neutron scattering length density across the bilayer. Main component of the FTNS is soybean phospholipids (mixture of 6 different saturated and unsaturated phospholipids). Important result from the synchrotron experiments is evaluation of the polar head thickness. Nevertheless, to the decrease of the vesicle radius at the increase of the FTNS concentration from 25% to 50%, the thickness of the polar head region keeps permanent value about 8 Å – 10 Å.

Application of the hydrophobic-hydrophilic approximation of the neutron scattering length density creates possibility to determine the thickness of the hydrophobic region of the FTNS bilayer as 5.0±0.5 Å, which demonstrates the high permeability of water molecules through FTNS bilayer. This result will be verified in the future by different models, mainly the full model.

Definition of the small critical vesicles was formulated as vesicles with internal radius commensurable to the thickness of the lipid bilayer (internal radius exceeds the bilayer thickness no more 2 times) Neutron and synchrotron experimental results demonstrate that small critical vesicles of nanodrugs (doksolip, phospholipovit, nanoarbidol) possess surface charge in the region of pharmaceutical concentration. Maltose molecules provide the chemical and sterical stability of the nanodrugs. Important result of the project is experimental evidence of the possibility to characterize the nanodrugs at the concentration in water from 5 % to 50%. The effectiveness of neutron and synchrotron radiation as complementary methods was demonstrated.

The structure of nanodrugs is well determined via small-angle neutron scattering at concentration of nanodrugs in heavy water from 5% до 25% (w/w). Small-angle X-ray scattering is effective at concentration of nanodrugs from 25% and larger. Pharmaceutical concentration of the nanodrugs 25% (w/w) can be characterized via neutron and X-ray small-angle scattering. Complementary application of neutron and synchrotron radiation give more information about structure of the nanodrugs.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Ломбардо Д., Каландра П., Баррека Д., Магазу С., Киселев М. (Lombardo D., Calandra P., Barreca D., Magazu S., Kiselev M.)

Soft Interaction in Liposome Nanocarriers for Therapeutic Drug Delivery Nanomaterials (2016);

2. Земляная Е.В., Киселев М.А. (Zemlyanaya E.V., Kiselev M.A.)

Дегидрация межмембранного пространства многослойных мембран дипальмитоилфосфатидилхолина под действием диметилсульфоксида. Нейтронные и синхротронные исследования Кристаллография, МАИК Наука, Москва (2017);

3. Земляная Е.В., Киселев М.А., Жабицкая Е.И., Грузинов А.Ю., Аксенов В.Л., Ипатова О.М., Дружиловская О.С. (Zemlyanaya E.V., Kiselev M.A., Zhabitskaya E.I., Gruzinov A.Yu., Aksenov V.L., Ipatova O.M., Druzhilovskaya O.S.)

SFF analysis of the small angle scattering data for investigation of a vesicle systems structure. Journal of Physics, Conf. series. (2016);

4. Киселев М.А., Ломбардо Д. (Kiselev M.A., Lombardo D.)

Structural characterization in mixed lipid membrane systems by neutron and X-ray scattering BBA - General Subjects (2016).

**Год представления отчета**

**2017**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Везикулярная структура пяти нанолекарств на основе соевых фосфолипидов (фосфолипидная транспортная наносистема, индолип, фосфолиповит, доксолип, наноарбидол) определена взаимодополняющим применением малоуглового рассеяния нейтронов в интервале концентраций лекарств в тяжелой воде 5% – 25% по весу и методом малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения в интервале концентраций лекарств в воде 20% – 40%.

Размер и полидисперсность размера везикул зависят от концентрации мальтозы. Увеличение концентрации мальтозы уменьшает размер и полидисперсность везикулы. Начиная с 15% концентрации мальтозы происходит формирование везикулярной системы низкойполидисперсности. Двадцать весовых процентов мальтозы в воде является наиболееподходящей концентрацией для формирования нанолекарств. Такая концентрация мальтозысоответствует 25% концентрации нанолекарства в воде.

Развита концепция критически малых везикул, как везикул, у которых внутренний радиус близок кзначению толщины липидного бислоя. Исследованные нанолекарства разбиваются на два типа.

Первый тип (основанный на фосфолипидной транспортной наносистеме) является малымивезикулами с радиусом, в три раза большим толщины липидного бислоя. Второй, основанный нафосфолиповите (фосфолиповит, доксолип, наноарбидол), является критически малымивезикулами. Критически малые везикулы создаются при наличии фосфатидилэтаноламина влипидном бислое соевых фосфолипидов.

***на английском языке***

The vesicular structure of the five nanodrugs based on the soybean phosphatidylcholines (phospholipid transport nanosystem, indolip, phospholipovit, doksolip, nanoarbidol) was established via complementary application of the small-angle neutron scattering for nanodrugs concentration range 5% – 25% w/w in heavy water and via small-angle X-ray scattering at concentration range 20% – 40% in water.

Size and polydispersity of the vesicle depend on the maltose concentration. Size and polydispersity of the vesicle decrease at increase of the maltose concentration. Twenty percent (w/w) of the maltose in water is more appropriate concentration for the formation of the nanodrugs. Such maltose concentration corresponds to the 25% concentration of the nanodrugs in the water.

The concept of the critically small vesicle was developed as vesicle, which internal radius is equal to the bilayer thickness. Our results show that nanodrugs divide on the two families.

One based on the phospholipid transport nanosystem is small vesicle with radius which three times larger the lipid bilayer thickness. Other one based on the phospholipovit (phospholipovit, doksolip, nanoarbidol) is critically small vesicles. Critically small vesicles is produced under addition of the phosphatidylethanolamine into the lipid bilayer of soybean phosphatidylcholines.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Башашин М.В., Земляная Е.В., Жабицкая Е.И., Киселем М.А., Сапожникова Т.Ф. (Maxim Bashashin, Elena Zemlyanaya, Evgeniya Zhabitskaya, Mikhail Kiselev, Tatyana Sapozhnikova)

Determination of the Vesicular Systems Parameters: Parallel Implementation and Analysis of the PTNS Vesicle Structure European Physics Journal (EPJ) – Web of Conferences (2018 г.)

2. Башашин М.В., Земляная Е.В., Сапожникова Т.Ф., Киселев М.А. (Bashashin M.V., Zemlyanaya E.V., Sapozhnikova T.P., Kiselev M.A.)

Analysis of Polydispersed vesicular Systems Structure: Parallel Implementation of the Separated Form Factors Method Mathematical Modeling and Computational Physics (Dubna, 3–7 July, 2017): Book of Abstracts — Dubna: JINR, 2017. — 158 p. (2017 г.)

3. Земляная Е.В., Киселев М.А., Жабицкая Е.И., Аксенов В.Л. (E.V. Zemlyanaya, M.A. Kiselev, E.I. Zhabitskaya, V.L.Aksenov)

Analysis of small angle neutron scattering data for investigation of the phospholipid transport nanosystem structure XXII International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications (10-16 September, 2017, Varna, Bulgaria) Program, Abstracts (2017 г.)

4. Земляная Е.В., Киселев М.А., Лукьянов К.В., Попов И.Р., Турапбай К.О. (Zemlyanaya E.V., Kiselev M.A., Lukyanov K.V., Popov I.R., Turapbay K.O.)

Онлайн-интерфейс для исследования структуры фосфолипидных везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния нейтронов на основе модели разделенных формфакторов Системный анализ в науке и образовании (2017 г.)

5. И.Д. Дмитриев, А.И. Иваньков, М.А. Киселев (Dmitriev I.D., Ivankov A.I., Kiselev M.A.)

Везикулярная структура нанолекарства Доксолип V Конференция по малоугловому рассеянию нейтронов "МУРомец 2017" (20-22 сентября 2017 г. Гатчина, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ) Сборник тезисов и программа (2017 г.)

6. Киселев М.А. (Kiselev M.A.)

Structure of the nanodrugs based on the soybean phosphatidylcholine. SANS study International conference Condensed Matter Research at the IBR-2. Dubna, October 9-12, 2017. Abstract book, (2017 г.)

7. Киселев М.А. (Kiselev M.A.)

Структура нанолекарств V Конференция по малоугловому рассеянию нейтронов "МУРомец 2017" (20-22 сентября 2017 г. Гатчина, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ) Сборник тезисов и программа, (2017 г.)

8. Киселев М.А., Земляная Е.В. (Kiselev M.A., Zemlyanaya E.V.)

Dimethyl Sulfoxide-Induced Dehydration of the Intermembrane Space of Dipalmitoylphosphatidylcholine Multilamellar Vesicles: Neutron and Synchrotron Diffraction Study Pleiades Publishing, Inc (2017 г.)

9. Маслова В.А., А.И. Иваньков, А.Ю. Грузинов, А.В. Земляная, М.А. Киселев (Maslova V.A., Ivankov O.I., Gruzinov A.Yu., Zemlyanaya E.V., Kiselev M.A.)

Исследование структуры фосфолипидной транспортной наносистемы методами МУРН и МУРР V Конференция по малоугловому рассеянию нейтронов "МУРомец 2017" (20-22 сентября 2017, Гатчина). Сборник тезисов и программа (2017 г.)

10. Маслова В.А., Киселев М.А. (Maslova V.A., Kiselev M.A.)

Структура мицелл холата натрия

Кристаллография (2018 г.)

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**14-12-00896**

Руководитель проекта

**Балагуров Анатолий Михайлович**

Название проекта

Real time – in situ нейтронный структурный анализ материалов и процессов в малогабаритных источниках электрического тока

Вид конкурса

Конкурс 2014 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2014–2016**

**Год представления отчета**

**2014**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Основной целью работ по проекту является получение новой структурной информации о материалах, использующихся в малогабаритных источниках электрического тока, и процессах заряда-разряда в них протекающих. Основной экспериментальный метод – дифракция нейтронов высокого разрешения в режиме real time – in situ.

В 2014 году работы в рамках проекта выполнялись по четырем основным направлениям: модернизация некоторых узлов нейтронного дифрактометра ФДВР на реакторе ИБР-2, изготовление специализированных электрохимических ячеек, проведение тестовых и структурных экспериментов с перспективными электродными материалами, создание программного обеспечения для обработки больших массивов данных, получаемых в кинетических экспериментах.

Основные узлы нейтронного фурье-дифрактометра высокого разрешения (ФДВР), на котором в основном ведется экспериментальная работа по проекту, были сконструированы и изготовлены в начале 1990-х годов. Только некоторые из них были модернизированы за прошедшее время, поэтому основные средства по проекту предполагается использовать на решение этой задачи. Работа началась уже в текущем году и, в частности, сумма около 2 млн. руб. потрачена на закупку оборудования, обеспечивающего прецизионное перемещение фурье-прерывателя, и закупку камеры высокого разрешения для нейтронной интроскопии изучаемых объектов (радиографические и томографические эксперименты).

Для получения детальной информации о структурных перестройках в электродах аккумулятора непосредственно в ходе процессов заряда – разряда разработана и изготовлена специализированная электрохимическая ячейка. Она хорошо адаптирована к условиям на ФДВР (плоская геометрия конструкции) и позволяет проводить in situ эксперименты с электродными материалами при различных режимах по току и напряжению.

В рамках проекта начата работа по созданию программного обеспечения для визуализации и автоматизированной обработки больших массивов экспериментальных данных, накапливаемых в ходе длительных in situ экспериментов. Оно адаптировано к особенностям используемой экспериментальной установки – TOF-дифрактометр с разверткой спектров по времени пролета. Обработка дифракционных спектров включает анализ геометрических характеристик отдельных пиков и использование метода Ритвельда для определения эволюции структурных параметров материала.

В соответствии с планом работ на 2014 год проведен целый ряд запланированных нейтронных дифракционных экспериментов с разнообразными электродными материалами. В их число входили твердые растворы со структурой оливина и шпинели, структурные модификации оксида титана, составы со структурой типа браунмиллерита. Для большинства измеренных дифракционных спектров проведена их обработка с использованием метода Ритвельда. Полученные структурные результаты являются основой при планировании новых экспериментов в 2015 году.

***на английском языке***

The main aim of the project is to receive new information on structure of materials used in rechargeable energy sources, and about charge-discharge processes in these materials. The main experimental method is the high resolution neutron diffraction in real time – in situ mode.

In 2014 works within the project’s framework were performed in four general areas: modernization of several units of HRFD diffractometer installed at the beamline of the IBR-2 reactor, manufacturing of specialized electrochemical cells, preliminary and principal experiments with promising electrode materials, development of special software for processing of large arrays of diffraction data obtained in kinetic experiments.

High resolution Fourier diffractometer (HRFD) is the basis of experimental part of this project. Main parts of HRFD have been constructed and manufactured in the beginning of 1990’s. Only some of them have been modernized since. Thus, the largest part of the project funds is allocated for HRFD modernization. Modernization activities begun already this year; in particular, about 2 million rubles is spent on equipment for precise control of Fourier chopper movement and for a high resolution camera for simultaneous neutron radiography studies of samples (including neutron tomography experiments).

A specialized electrochemical cell has been developed and manufactured to obtain detailed information on structural changes in batteries electrodes in situ during charge-discharge processes. It is well adapted to experimental setup of HRFD (flat geometry) and allows conducting in situ experiments with electrode materials in different current and voltage regimes.

The work on development of the unique software has been started within the project framework. This software is specifically designed for processing and visualization of large experimental data arrays obtained during long run in situ experiments. The software is adapted to the peculiarities of HRFD, i.e., TOF-diffractometer with diffraction patterns registered as a function of time of flight of thermal neutrons. The processing of diffraction spectra includes the analysis of geometrical characteristics of individual diffraction peaks and the application of Rietveld method for the examination of structure parameters evolution.

A number of neutron diffraction experiments with different electrode materials have been performed in 2014 according to the project schedule. These materials include solid solutions with the spinel or olivine crystal structures, structural modifications of titanium oxides, materials with brownmillerite-type structure. The Rietveld refinement of diffraction patterns has been performed for most of studied structures. Obtained structural data are the basis for new experiments planned for 2015.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Балагуров А.М., Бобриков И.А, Бокучава Г.Д, Журавлев В.В., Симкин В.Г

Корреляционная фурье-дифрактометрия: 20-летний опыт эксплуатации на реакторе ИБР-2. Физика элементарных частиц и атомного ядра (2015);

2. Балагуров А.М., Бобриков И.А., Самойлова Н.Ю., Дрожжин О.А., Антипов Е.В.

Применение рассеяния нейтронов для анализа процессов в литий-ионных аккумуляторах. Успехи химии (2014);

3. Злоказов В.Б, Балагуров Д.А., Бобриков И.А., Самойлова Н.Ю., Балагуров А.М.

Визуализация и анализ нейтронных дифракционных real-time данных. Препринт ОИЯИ (2014).

**Год представления отчета**

**2015**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Основной целью работ по проекту является получение новой структурной информации о материалах, использующихся в малогабаритных источниках электрического тока, и процессах заряда-разряда в них протекающих. Основной экспериментальный метод – дифракция нейтронов в режиме высокого разрешения и в режиме высокой интенсивности (in-situ – real-time эксперименты).

В 2015 году продолжались методические работы по развитию экспериментальных установок, разработке и изготовлению электрохимических ячеек, созданию программного обеспечения для обработки больших массивов данных, получаемых в кинетических экспериментах. Основным методическим результатом 2015 года является начало работ на нейтронном дифрактометре RTD, специально сконструированном для real-time (RT) экспериментов, что позволило заметно расширить экспериментальные возможности. Светосила и разрешающая способность RTD дают возможность эффективно анализировать структурные перестройки, происходящие в материале электродов электрохимических ячеек и коммерчески доступных аккумуляторов.

В соответствии с планом работ на 2015 год проведен целый ряд нейтронных дифракционных экспериментов с разнообразными электродными материалами, в том числе с использованием электрохимических ячеек. В число исследованных материалов входили оксиды со структурой шпинелей, двойных и слоистых перовскитов. Проведен подробный анализ полученных структурных данных (в основном с использованием метода Ритвельда). При анализе процессов заряда-разряда в коммерческом аккумуляторе типа 18650, емкостью C = 3100 мА·ч, анодом из графита и LiNi0.8Al0.1Co0.1O2 катодом получена полная информация о последовательности возникающих и исчезающих структурных фаз и количестве лития переходящего между электродами при разных скоростях процессов, С/3, С/5 и С/10. Полученные результаты являются основой при планировании новых экспериментов в 2016 году.

Результаты работ по проекту отражены в пяти публикациях в российских и международных научных журналах и доложены на нескольких российских и международных конференциях.

***на английском языке***

The main aim of the project is to receive new information on structure of materials used in rechargeable energy sources, and about charge-discharge processes in these materials. The main experimental method is neutron diffraction in high resolution mode and high-intensity mode (in situ – real time experiments).

In 2015, methodical works on development of experimental facilities, development and manufacturing of specialized electrochemical cells, development of software for processing of large arrays of diffraction data obtained in kinetic experiments were continued. The main methodological result in 2015 is begging of work at neutron diffractometer RTD, specially designed for real-time (RT) experiments, which allowed considerably expand the experimental possibilities. The intensity and resolution of RTD allow to effectively analyze the structure changes in the electrode materials of electrochemical cells and commercially available batteries.

According to the project schedule, in 2015 a number of neutron diffraction experiments with a variety of electrode materials, including the use of electrochemical cells have been performed. The materials studied include oxides with spinel-structure, double and layered perovskites. The detailed analysis (mainly Rietveld-analysis) of obtained structural data has been performed. The complete information on a sequence of appearing and disappearing structural phases and amount of lithium over between the electrodes at different cycling speed, the C / 3, C / 5 and C / 10, has been obtained from analysis of charge-discharge processes in commercial battery of 18650-type (capacity of 3100 mA·h) with graphite anode and cathode material LiNi0.8Al0.1Co0.1O2. Obtained results are the basis for new experiments planned for 2016. The results are published in five publications in Russian and international journals, and presented on several Russian and international conferences.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Ata-Allah S.S., Balagurov A.M., Hashhash A., Bobrikov I.A., Hamdy Sh.

Refinement of atomic and magnetic structures using neutron diffraction for synthesized bulk and nano nickel zinc gallate ferrite Physica B: Condensed Matter (2016) WOS SCOPUS;

2. Zlokazov V.B., Bobrikov I.A., Balagurov A.M.

Mathematical methods for the analysis of polycrystal phase evolutions European Physical J. (2015) WOS SCOPUS;

3. Chernova V.V., Istomin S.Ya., Antipov E.V.,. Lobanov M.V,. Bobrikov I.A, Yushankhai V.Yu. , Balagurov A.M., Hsu K.Y., Lin J.-Y., Chen J. M., Lee J. F,. Volkova O.S, Vasiliev A.N.

Wide range tuning of Mo oxidation state and magnetic phase diagram in La1-xSrxFe2/3Mo1/3O3 Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics (2016) WOS SCOPUS;

4. Балагуров А.М., Бескровный А.И.,. Журавлев В.В. Миронова Г.М., Бобриков И.А., Неов Д., Шеверев С.Г.

Дифрактометр для исследований переходных процессов в реальном времени на импульсном источнике нейтронов ИБР-2 Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (2016) SCOPUS РИНЦ;

5. Злоказов В.Б., Балагуров Д.А., Бобриков И.А., Самойлова Н.Ю., Балагуров А.М.

Визуализация и анализ нейтронных дифракционных real-time данных Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. (2016) SCOPUS РИНЦ.

**Год представления отчета**

**2016**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Основной целью работ по проекту является получение новой структурной информации о материалах, использующихся в малогабаритных источниках электрического тока, и процессах заряда-разряда в них протекающих. Основной экспериментальный метод – дифракция нейтронов в режиме высокого разрешения и в режиме высокой интенсивности (in-situ – real-time эксперименты).

В 2016 году продолжались методические работы по развитию экспериментальных установок, разработке и изготовлению электрохимических ячеек, созданию программного обеспечения для обработки больших массивов данных, получаемых в кинетических экспериментах. Основным методическим результатом 2016 года является радикальная модернизация двух важнейших устройств HRFD (High-Resolution-Fourier-Diffractometer) – зеркального нейтроновода и быстрого фурье-прерывателя с системой управления. Новый нейтроновод (полная длина 18.8 м) изготовлен и смонтирован специалистами SwissNeutronics летом 2016 года. Он является плоскопараллельным в горизонтальной плоскости (ширина окна 15 мм) и сходящимся по параболе в вертикальной плоскости (высота входного окна 200 мм, выходного – 100 мм). Покрытие стекол – суперзеркальное на основе Ni/Ti с критическим индексом m = 1.75. Введение в строй нового зеркального нейтроновода на HRFD позволило увеличить поток нейтронов на образце в среднем в ~2.5 раза в области межплоскостных расстояний 1.5 – 2 Å и в 3 – 4 раза при d < 1 Å.

Новый фурье-прерыватель (Mirrotron, Венгрия) введен в эксплуатацию в августе 2016 года. В отличие от предыдущей версии он установлен на трансляционном столе, позволяющем при необходимости быстро выдвигать прерыватель из пучка и прецизионно устанавливать его обратно в рабочую позицию, что позволяет сразу в ≈5 раз увеличить полный поток нейтронов на образце. Контраст функции пропускания нового фурье-прерывателя (отношение интенсивностей в открытом и закрытом состояниях прерывателя) составил величину, близкую к 100, что в ≈2 раза лучше, чем было у предыдущей версии.

В текущем году выполнена доработка основной конструкции уже изготовленных электрохимических ячеек. Общее количество ячеек, пригодных для нейтронного дифракционного эксперимента, доведено до 6. С ними выполнены многочисленные тестовые электрохимические и дифракционные эксперименты с целью оптимизации состава и толщины электродов и вспомогательных материалов, включая материалы с изотопическим замещением. В частности, показано, что в нейтронных экспериментах фторированный сепаратор Immobilon не дает какого- либо преимущества по сравнению с обычным полипропиленовым сепаратором, в то же время, дейтерирование электролита ощутимо улучшает отношение эффекта к фону. В модельных экспериментах с доработанными электрохимическими ячейками получены дифракционные данные очень высокого качества, позволяющие получать количественную информацию о доле материала катода, вовлеченного в процесс заряда, и делать заключения о кинетике этого

процесса. В структурных экспериментах с сериями твердых растворов хромита и алюмината меди Cu(Cr2-xAlx)O4 и феррита и алюмината меди Cu(Fe2-xAlx)O4 (0 ≤ x ≤ 2), приготовленных в различных микроструктурных формах, установлены области формирования различных структурных фаз (кубической, тетрагональной или двухфазного состояния) и с хорошей точностью (на уровне 3%) найдены изменения степени инверсии шпинели в зависимости от x.

Проведено несколько in operando экспериментов с коммерческими аккумуляторами типа 18650 с разным материалом катода. Так, поведение аккумулятора с заявленной емкостью 3100 мA·ч и общей массой 46 г изучалось для трех различных скоростях его заряда-разряда: С/3, С/5 и С/10 (С – полная емкость аккумулятора). Во взаимодействии ионов лития с графитовым электродом аккумулятора не найдено каких-либо заметных отклонений от ожидаемого поведения. Для разных режимов заряда отличия касаются, прежде всего, доли конечной фазы LiC6 в материале анода. Для материала катода при малых скоростях (С/5 и С/10) заряда в зависимости от содержания лития наблюдалось сильно нелинейное поведение некоторых его структурных параметров: периода вдоль гексагональной оси, расстояния Me – O в кислородном октаэдре MeO6 и межслоевого расстояния О–О. Причем изменения двух последних расстояний не полностью повторяют по своему характеру изменение параметра элементарной ячейки, что отражает сложное взаимодействие различных влияющих на процесс факторов. Анализ показал, что вариации межатомных и межслоевых расстояний, а также параметров элементарной ячейки материала катода в зависимости от концентрации лития в целом соответствуют модельным расчетами, проведенным для LiCoO2, что связано с общностью факторов, действующих в этом типе структур, хотя некоторые особенности в LiNi0.8Co0.15Al0.05O2 выражены более резко.

Проведена вся необходимая работа для анализа данных о процессах микроструктурной деградации электродных материалов при накоплении дефектов в ходе их продолжительной работы и классический метод Вильямсона-Холла полностью адаптирован для определения микроструктурных характеристик материала на основе дифракционных спектров, измеряемых на дифрактометре по времени пролета с корреляционной электроникой накопления. Разработанные алгоритмы проверены на нескольких наборах дифракционных данных, измеренных на простых структурах (сплавах на основе железа), ярко проявляющих разнообразные эффекты уширения линий. На их примере показано как эти эффекты конкретно проявляются в функциональных зависимостях ширины пиков от межплоскостного расстояния, какую величину эффектов можно определять на HRFD и какая при этом возможна точность результатов. Сделан вывод, что метод Вильямсона-Холла, как наиболее простой идеологически и наглядный в реализации вполне достаточен для первого этапа оценки микроструктуры электродных материалов.

В целом, с точки зрения реализации проекта РНФ, 2016 год оказался исключительно успешным. Сейчас можно уверенно утверждать, что в результате работ по проекту в России появились возможности проведения нейтронных дифракционных исследований в области электрохимии на уровне, имеющимся в 3 – 5 лучших нейтронных центрах в мире. Эти возможности включают ex situ структурный анализ, in situ эксперименты в реальном времени с электродными материалами в специализированных электрохимических ячейках и in operando исследования коммерческих аккумуляторов.

***на английском языке***

The key goal of this project is to obtain new information on structure of materials used in construction of compact batteries and its changes during the processes of charge and discharge. The main experimental method is the high-resolution and high-intensity neutron diffraction (in-situ – real-time experiments).

During 2016, we continued methodological works on improvement of experimental facilities, on development and manufacturing of electrochemical cells, on design of the new software to process large data obtained in kinetic experiments. The main achievement of 2016 is the drastic upgrade of two major components of the HRFD (High-Resolution-Fourier-Diffractometer), i.e., mirror neutron guide and fast Fourier chopper with its control system. New 18.8 meters long neutron guide was manufactured and installed by the SwissNeutronics company in summer 2016. It is plane-parallel in the horizontal plane (15 mm wide entrance window) and it is parabolic convergent in vertical plane (200 mm high entrance window to 100 mm exit window). Neutron guide is made of glass coated with Ni/Ti based supermirror with critical index m = 1.75. As a result, neutron flux in the HRFD sample position was increased by ~2.5 times in the range of lattice spacings d = 1.5 – 2 Å, and by 3-4 times for d < 1 Å. New Fourier chopper (produced by Mirrotron, Hungary) was commissioned in August 2016. As opposed to the previous chopper, it is installed on the translation table that offers the possibility to rapidly move the chopper out and into the beam with a great precision. As a consequence, the flux in the sample position could be immediately increased in ≈5 times.

A contrast of the transmission function of the new Fourier chopper (a ratio of intensities registered in open and closed states of the chopper) is about 100, which is ≈2 higher (and better) than the contrast of the previous chopper. In 2016 we improved the basic design of manufactured electrochemical cells. Total number of cell produced especially for neutron diffraction experiments reached 6. These cells have been used in a number of electrochemical and diffraction test experiments in order to optimize composition and thickness of electrodes and other constituents, including material with isotopic substitution. In particular, it was shown that utilization of fluorinated separator ImmobilonP in neutron diffraction experiments has practically no advantages over a common polypropylene separator. In the same time, the utilization of deuterated electrolyte has pronounced effect on diffraction patterns improvement due to significant increase of signal-to-background ratio. Model experiments with improved electrochemical cells confirmed he possibility to obtain high quality diffraction data that allowed obtaining quantitative information on the volume part of the cathode participating in the charge process and investigating kinetics of this process.

We investigated a series of solid solutions of copper chromate and aluminate Cu(Cr2-xAlx)O4 and iron ferrite and aluminate Cu(Fe2-xAlx)O4 (0 ≤ x ≤ 2) with different microstructures. The regions of formation of cubic and tetragonal phases, as well as the two-phase region, were established. Dependencies of spinel inversion degree on x were determined with high precision (better than 3%).

Several in operando experiments were performed with commercial 18650 type batteries with different cathodes. E.g., the battery with nominal capacity C = 3100 mAh and total weight of 46 g was studied at three different charge-discharge rates: C/3, C/5 and C/10. The behavior of the graphite anode and its interaction with lithium ions was according to the previous observations. Practically, the difference in charge rate only results in different LiC6 content in the anode of the completely charged battery. At low charge rates (C/5 and C/10) we observed a non-linear dependence of cathode unit cell parameter along the six-fold axis on lithium content. Me-O distance in MeO6 oxygen octahedra and spacing between oxygen layers change in a similar, but not exactly the same way, reflecting a complexity of interactions in the cathode material. Analyzed variations of interatomic and interlayer distances and unit cell parameters of the cathode material (depending on the delithiation degree) in general correspond to first principles calculations made for LiCoO2 oxide. This is caused by the similarity of physical interactions in the structures of such type, though LiNi0.8Co0.15Al0.05O2 demonstrates some peculiarities. Significant efforts have been made in the field of analysis of microstructural degradation of electrode materials in the course of their exploitation. Classical Williamson-Hall method has been completely adapted for the extraction of microstructure parameters of materials from diffraction patterns measured on the time-of-flight diffractometer utilizing correlation scheme of data acquisition. We tested algorithms on several simple structures, e.g., iron alloys, demonstrating different diffraction peak broadening effects. Dependencies of different types of peak broadening on lattice spacing and Miller indices, limitations posed by the resolution of the HRFD and precision of obtained results were studied thoroughly. We have demonstrated that simple and obvious Williamson-Hall method fits the task of estimating microstructure parameters of electrode materials.

In general, from the point of view of the realization of this project, the year 2016 was exceptionally successful. We can confidently affirm that as a result of the project, the possibilities to apply the method of neutron diffraction for the investigations in the field of electrochemistry emerged in Russia. The level of experimental capabilities is comparable to that available in 3-5 best neutron scattering centers of the world. These capabilities include ex situ structure analysis, in situ real-time experiments with electrode materials in specialized electrochemical cells and in operando studies of commercial batteries.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Балагуров А.М. (Balagurov A.M.)

Дифракция нейтронов для решения структурных иматериаловедческих задач LAMBERT, Academic Publishing (2017);

2. Балагуров А.М., Бобриков И.А., Мухаметулы Б., Сумников С.В., Головин И.С. (Balagurov A.M., Bobrikov I.A., Mukhametuly B., Sumnikov S.V., Golovin I.S.) Когерентное кластерное упорядочение атомов в интерметаллиде Fe-27Al Письма в ЖЭТФ/JETP Letters (2016);

3. Бобриков И.А., Самойлова Н.Ю., Балагуров Д.А., Иваньшина О.Ю., Дрожжин О.А., Балагуров А.М. (Bobrikov I.A., Samoylova N.Yu., Balagurov D.A., Ivanshina O.Yu., Drozhzhin O.A., Balagurov A.M.)

Анализ структурных трансформаций в литий-ионном аккумуляторе с помощью

дифракции нейтронов Электрохимия/Russian Journal of Electrochemistry (2017);

4. Иваньшина О.Ю., Бобриков И.А., Сумников С.В., Балагуров А.М. (Ivanshina O.Yu., Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Balagurov A.M.)

The methodology of electrode manufacturing for special designed Lithium-ion cells Proccedings of the XX International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (2016)

5. Косова Н.В., Подгорнова О.А., Бобриков И.А., Каичев В.В., Бухтияров А.В. (Kosova N.V., Podgornova O.A., Bobrikov I.A., Kaichev V.V., Bukhtiyarov A.V.)

Approaching better cycleability of LiCoPO4 by vanadium modification Materials Science and Engineering B (2016);

6. Шерстобитова Е.А., Губкин А.Ф., Бобриков И.А., Калашнова А.В., Пантюхина М.И. (Sherstobitova E.A., Gubkin A.F., Bobrikov I.A., Kalashnova A.V., Pantyukhina M.I.)

Bottle-necked ionic transport in Li2ZrO3: high temperature neutron diffraction and impedance spectroscopy Electrochimica Acta (2016).

**ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ**

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**17-12-01367**

Руководитель проекта

**Григоренко Леонид Валентинович**

Название проекта

Поиск новых видов радиоактивного распада легких экзотических ядер

Вид конкурса

Конкурс 2017 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2017–2019**

**Год представления отчета**

**2017**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Строительство и ввод в эксплуатацию новой низкофоновой экспериментальной зоны фрагмент-сепаратора ACCULINNA-2 были завершены в марте 2017 года. В апреле 2017 года была проведена настройка установки для производства пучков РИ и выполнены установочные измерения производства ряда радиоактивных ионов [1-5]. Было показано полное соответствие фрагмент-сепаратора ACCULINNA-2 проектным параметрам. При этом выходы радиоактивных ионов на установке ACCULINNA-2 в 20-25 раз превысили аналогичные величины на фрагмент- сепараторе ACCULINNA. В течение лета-осени 2017 года шла подготовка к первым экспериментам с пучками РИ.

Первое научное измерение на установке ACCULINNA-2 было проведено в период 27.11.2017-8.12.2017. Эксперимент был нацелен на изучение каналов реакции 6He + d при энергии ~38 МэВ/нуклон: a) измерение упругого рассеяния и неупругого рассеяния; б) заселение возбуждённых состояний 7Не в реакции передачи нейтрона с дейтериевой мишени на налетающий снаряд. Идет предварительный анализ полученных данных и подготовка к «второй порции» пучкового времени для этой же реакции, которая запланирована на начало 2018 г. Во втором «заходе» для этой

реакции будут оптимизированы параметры установки и измерения будут проведены в более широком угловом диапазоне, вплоть до углов 175 градусов в системе центра масс.

В течение 2017 года продолжалась обработка полученных ранее экспериментальных данных и публикация полученных результатов [6,7,8]:

1. Был завершен анализ данных и опубликованы результаты эксперимента по поиску двухпротонного распада первого возбужденного состояния 17Ne [6]. Низколежащие состояния 17Ne в этом эксперименте заселялись в реакции передачи 1H(18Ne,d)17Ne. Двухпротонный распада первого возбужденного состояния 17Ne является давно обсуждаемой проблемной темой. Значительная часть интереса к этому распаду связана с тем, что он является обратным процессом для радиационного двухпротонного захвата 15O+p+p->17Ne+gamma. Этот процесс важен для теории астрофизического rp-процесса, так как является одним из механизмов преодоления «точки ожидания» rp-процесса, каковой является долгоживущее ядро 15O. С экспериментальной точки зрения основная трудность здесь связана с исключительно низким уровнем ветвления в 2p канал (по оценкам, по крайней мере <10^{-5}) по сравнению с гамма-каналом. Первым практическим результатом эксперимента является новый предел Gamma\_{2p}/ Gamma\_γ < 1.6(3) × 10^{−4} который в 50 раз лучше, чем предыдущее значение, доступное в литературе. Другим результатом этой работы явилась разработка и практическая реализация новой экспериментальной методики, получившей название «комбинированной массы». Эта методика открывает новые возможности для изучения резонансов с очень низким

отношением ширины распада в канал с испусканием частиц к ширине гамма-распада. Свойства таких резонансов важны для понимания процессов резонансного радиационного захвата для целей ядерной астрофизики. Работа [6] была выдвинута на соискание премии ОИЯИ за 2017 год в области экспериментальных работ.

2. Продолжился анализ данных и публикация результатов эксперимента по изучению продуктов реакций выбивания и неупругого возбуждения на пучке 31Аг на установке EXPERT. Эксперимент проводился на фрагмент-сепараторе FRS (GSI, Дармштадт). Он является «пилотным» для установки EXPERT [8], так как в нем впервые были задействованы ее основные подсистемы: (i) трекинговая система из микростриповых кремниевых детекторов, (ii) массив гамма-

детекторов GADAST, (iii) OTPC – времяпроекционная камера с оптическим конвертором. Первые результаты этого эксперимента были ранее опубликованы в письмах [I.Mukha et al., PRL 115, 202501 (2015)] и [T.Golubkova et al., PLB 762 (2016) 263] (ниже обсуждается также теоретический аспект этих работ). В работе [7] детально рассматривается спектроскопия до этого неизученных изотопов 29Cl и 30Ar.

Активно проводились разработка и испытания перспективных детекторных систем [8,9,10]. В частности, были получены новые данные о радиационной стойкости кремниевых структур при облучении детекторов на установке АКУЛИНА ионами 40Ar с полной энергией 1,62 ГэВ [9] и сделано сравнение с результатами измерений в ЦЕРН при облучении протонами 23 ГэВ. Установлено, что степень деградации кремниевых детекторов примерно в 10 раз выше

при облучении ионами аргона по сравнению с релятивистскими протонами. Так, при суммарной дозе ~10^12 ионов аргона на кв.см уже происходила инверсия знака объёмного заряда и детектор переставал работать в штатном режиме.

В работе [10] проводились испытания быстродействующих кремниевых детекторов и соответствующей электроники. Временное разрешение, полученное при облучении демонстраторов ионами ксенона и углерода на сепараторе FRS (Дармштадт) при энергии 600 АМэВ, достигало 20 пс и 100 пс, соответственно. Это полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым для время-пролётных детекторов на установке Super-FRS и проведению первых

экспериментов в рамках программы исследований проекта EXPERT [8].

В плане подготовки экспериментальной программы на 2018 год были выполнены МК симуляции перспективных экспериментов

(1) по поиску 7H. Принято решение об использовании реакции 2H(8He,3He)7H в постановке с использованием магнита-спектрометра нулевого угла и массива нейтронных детекторов. Постановка планируемого эксперимента докладывалась Г.М. Тер-Акопьяном на расширенном заседании Совета РАН по физике тяжелых ионов 01.12.2017.

(2) по исследованию двухпротонной радиоактивности ранее не наблюдавшегося изотопа 26S. Предложение эксперимента S458 было представлено на PAC в GSI (Дармштадт, Германия). Проведение эксперимента предполагается в 2018-2019 гг на установке EXPERT [8] внутри фрагмент-сепаратора FRS.

В области теоретических работ были завершены и направлены в печать работы по следующим темам.

1. Продолжено изучение переходной динамики в трехчастичных распадах [7]. Эта тема была впервые поднята в работах [I.Mukha et al., PRL 115, 202501 (2015)] и [T.Golubkova et al., PLB 762 (2016) 263 ]. Было показано, что для изучения трехчастичных распадов (один из примеров – 2p радиоактивность) особый интерес представляют процессы, находящиеся в пограничной области между «чистыми» механизмами распада, такими как «истинный» 2p распад и последовательный 2p распад. Это связано с тем, что динамика распада в таких областях (по аналогии с динамикой фазовых переходов) демонстрирует высокую чувствительность к параметрам задачи. С практической точки зрения это означает возможность их определения из экспериментальных данных с повышенной точностью. В работе [7] это рассмотрение ведется на примере анализа данных из распада недавно открытого изотопа 30Ar.

2. Была проведена методическая работа изучению «динейтронного» распада [11]. Интерпретация распадов с испусканием двух нейтронов как «динейтронного» распада (аналогично распадов с испусканием двух протонов как «дипротонного» распада) является довольно распространенным приближением. В работе [11] были продемонстрированы ранее не поднимавшиеся проблемы этого подхода и подвергнуты критике основанные на нем методы анализа экспериментальных данных.

ССЫЛКИ

[1] http://flerovlab.jinr.ru/flnr/accul\_2/motiv.html - На сайте ЛЯР ОИЯИ: Специальный научный семинар ЛЯР ОИЯИ 13.04.2017 посвященный вводу в эксплуатацию установки ACCULINNA-2. Доклады С.А. Крупко, А.С. Фомичева и Л.В. Григоренко.

[2] http://radio1.news/news/podmoskovnyy-uchyenyy-predryek-konets-tablitsy-mendeleeva/?sphrase\_id=10642 - На сайте Радио1 (радиостанция московской области): 31.05.2017 интервью Л.В. Григоренко о перспективах развития исследований на пучках радиоактивных изотопов в Дубне.

[3] http://indico.jinr.ru/conferenceDisplay.py?confId=251 - A.S. Fomichev, “Commissioning of the ACCULINNA-2 fragment separator and its day-one experiments”, 46th meeting of the PAC for Nuclear Physics, Dubna, 15 June 2017.

[4] http://wwwinfo.jinr.ru/jinrmag/pdf/17num25.pdf - В материалах еженедельника ОИЯИ 15.06.2017: А.С. Фомичев представляет установку ACCULINNA-2 и исследовательскую программу на 2017-2018 гг членам программно-консультативного комитета ОИЯИ по ядерной физике.

[5] http://www.jinr.ru/posts/novye-gorizonty-v-fizike-tyazhelyh-ionov/ - На сайте ОИЯИ: расширенное заседание Совета РАН по физике тяжелых ионов 01.12.2017 посвященное перспективным программам ЛЯР ОИЯИ на текущую семилетку и на период до 2030 г. Доклады С.А. Крупко, А.С. Фомичева и Л.В. Григоренко.

[6] P. G. Sharov, A. S. Fomichev, A. A. Bezbakh, V. Chudoba, I. A. Egorova, M. S. Golovkov, T. A. Golubkova, A. V. Gorshkov, L. V. Grigorenko, G. Kaminski, A. G. Knyazev, S. A. Krupko, M. Mentel, E. Yu. Nikolskii, Yu. L. Parfenova, P. Pluchinski, S. A. Rymzhanova, S. I. Sidorchuk, R. S. Slepnev, S. V. Stepantsov, G. M. Ter-Akopian, R. Wolski, “Search for 2p decay of the first excited state of 17Ne”, Physical Review C 96, 025807 (2017) [arXiv:1612.04697].

[7] X. Xu, I. Mukha, L.V. Grigorenko, C. Scheidenberger, L. Acosta, E. Casarejos, V. Chudoba, A.A. Ciemny, W. Dominik, J. Duenas-Diaz, V. Dunin, J.M. Espino, A. Estrade, F. Farinon, A. Fomichev, H. Geissel, T.A. Golubkova, A. Gorshkov, Z. Janas, G. Kaminski, O. Kiselev, R. Knobel, S. Krupko, M. Kuich, Yu.A. Litvinov, G. Marquinez-Duran, I. Martel, C. Mazzocchi, C. Nociforo, A.K. Orduz, M. Pfutzner, S. Pietri, M. Pomorski, A. Prochazka, S. Rymzhanova, A.M. Sanchez-Benitez, P. Sharov, H. Simon, B. Sitar, R. Slepnev, M. Stanoiu, P. Strmen, I. Szarka, M. Takechi, Y.K. Tanaka, H. Weick, M. Winkler, J.S. Winfield, M.V. Zhukov, “Spectroscopy of Excited States of unbound nuclei 30Ar and 29Cl”, Submitted to Physical Review C (2017) [arXiv:1710.05501].

[8] V. Chudoba for the EXPERT project, “The EXPERT project: part of the Super-FRS Experiment Collaboration”, Accepted to JPCS.

[9] V. Eremin, D. Mitina, A. Fomichev, O. Kiselev, N. Egorov, I. Eremin, A. Shepelev, E. Verbitskaya, “Comparative studies of silicon detector degradation under irradiation by heavy ions and relativistic protons”, Journal of Instruments (2017) in print.

[10] D. Kostyleva, O. Kiselev, A. Bezbakh, V. Chudoba, V. Eremin, A. Fomichev, A. Gorshkov, S. Krupko, I. Mukha, I. Muzalevskii, C. Scheidenberger, P. Sharov for the EXPERT/Super-FRS Experiment Collaboration, “Study of the silicon detectors for time-of-flight measurements at the super-frs facility and expert experiments at FAIR”, Submitted to Acta Physica Polonica B.

[11] L.V. Grigorenko, J.S. Vaagen, M.V. Zhukov, “What is a dineutron? Exploring its manifestation and nature in two-neutron emission using a dynamical dineutron model”, Submitted to Physical Review C (2017) [arXiv:1711.08899]

***на английском языке***

The construction and commissioning of the new low-background experimental zone of the ACCULINNA-2 fragmentseparator was completed in March 2017. In April 2017, a facility was set up for the production of radioactive ion (RI) beams and commissioning measurements were made for several RI beams [1-5]. The full compliance of the ACCULINNA-2 fragment-separator with design parameters was demonstrated. The yields of radioactive ions at the ACCULINNA-2 fragmentseparator were found to be 20-25 times higher than corresponding yields at the ACCULINNA fragment-separator. Preparations for the first experiments with RI beams were made during the summer-autumn of 2017. The first scientific measurement at the ACCULINNA-2 facility was carried out from 27.11.2017 to 8.12.2017. Channels of the 6He + d reaction at ~ 38 AMeV energy were studied: a) Measurements of elastic and inelastic scattering were performed; b) Population of the excited 7He states was studied in the neutron transfer reaction from the deuterium target to the incident projectile. Preliminary analysis of the data is currently performed together with preparations for the "second portion" of the beam time for the same reaction, scheduled for early 2018. In the second run, the parameters of the experimental setup will be optimized and measurements

will be performed in a wider angular range, up to 175 degrees in the center of mass frame. Analysis of the data obtained in the earlier experiments and publication of the obtained results [6, 7, 8] was continued during 2017:

1. For the experiment searching for the two-proton decay of the first excited state of 17Ne, the data analysis was completed and the results were published [6]. The low-lying states of 17Ne were populated in the 1H(18Ne,d)17Ne transfer reaction in this experiment. The two-proton decay of the first excited state of 17Ne is a long-discussed questionable topic. A significant interest to this decay channel is due to the fact that it is the inverse process for the radiative two-proton capture 15O+p+p-->17Ne + gamma. The latter process is important for the theory of the astrophysical rp-process, since it is one of the possible mechanisms for overcoming the "waiting point" of the rp-process which is the long-lived 15O nucleus. From an experimental point of view, the main difficulty is related to an extremely low ratio of branching to the 2p decay channel (estimated at least <10^{-5}) in comparison with the gamma decay channel. The first practical result of the experiment is the new limit Gamma\_{2p}/Gamma\_γ <1.6 (3) × 10^{-4} which is 50 times better than the previous value available in the literature. Another result of this work was the development and practical implementation of a new experimental technique, called the "combined mass". This technique gives new possibilities for investigation of resonances with a very low ratio of the decay width into the particle channel to the width of gamma decay. The properties of such resonances are important for understanding the processes of resonance radiation capture in nuclear astrophysics. Paper [6] was nominated for the 2017 JINR Prize in the field of experimental works.

2. The data analysis was continued for the experiment studying products of the knockout and inelastic excitation reactions with 31Аг beam and the results were published. The measurement was performed at the FRS fragment separator (GSI, Darmstadt). It was a pilot experiment for the EXPERT setup [8], because its main subsystems were employed for first time: (i) a tracking system consisting of microstrip silicon detectors, (ii) an array of GADAST gamma-detectors, and (iii) OTPC – time projection chamber with optical converter. First results of this experiment were published in papers [I.Mukha et al., PRL 115, 202501 (2015)] and [T.Golubkova et al., PLB 762 (2016) 263] (theoretical aspect of these works is discussed below). The spectroscopy of the previously unknown isotopes 29Cl and 30Ar was described in details in the new paper [7]. Development and testing of prospective detector systems was actively conducted [8,9,10]. In particular, new data on radiation stability of the silicon structures were obtained in tests of silicon detectors on the ACCULINNA facility where the detectors were irradiated by 40Ar ions with a total energy of 1.62 GeV [9]. These data were compared with results of the measurements of irradiation by 23 GeV protons at CERN. It was found that level of the degradation of silicon detectors irradiated by argon ions was approximately 10 times higher in comparison with those obtained in measurement with relativistic protons. Thus, for a total dose of ~10^12 argon ions per square centimeter, the sign inversion of the space charge takes place and the detector ceased to operate in the normal mode. Testing of the fast silicon detectors and corresponding electronics was carried out [10]. Time resolution of 20 ps and 100 ps was obtained during irradiation of the detector demonstrators by the xenon and carbon ions, respectively. Studies were performed at the FRS fragment-separator (GSI, Darmstadt) with beams energy 600 AMeV. The obtained time resolution fully meets the requirements for time-of-flight detectors at the Super-FRS facility and for the first experiments within the EXPERT research program [8]. In the course of preparation of the experimental program for 2018, the Monte-Carlo simulations of the prospective experiments were performed:

1. For the program of search for 7H ground state It was decided to use the reaction 2H(8He,3He)7H for search of the 7H ground state together with the experimental setup including zero-angle magnet spectrometer and array of neutron detectors. The layout of the proposed experimental setup was reported by G.M. Ter-Akopyan 01.12.2017 at the extended meeting of the RAS Council on Heavy Ion Physics.

2. Proposal of the S458 experiment, the search for the two-proton radioactivity of the previously not observed 26S isotope, was presented at the G-PAC at GSI (Darmstadt, Germany). The proposal was approved and it is expected to be carried out in 2019 at the fragment-separator FRS using the EXPERT [8] setup. In the field of theoretical works, the manuscripts on the following topics were completed and submitted to the referred journals:

1. The study of “transitional dynamics” in three-particle decays is continued [3]. This topic was for the first time considered in papers [I.Mukha et al., PRL 115, 202501 (2015)] and [T. Golubkova et al., PLB 762 (2016) 263]. It was demonstrated that for the three-particle decays (one of the examples is the 2p radioactivity), processes taking place in the boundary region between "pure" decay mechanisms, such as "true" 2p decay and sequential 2p decay, are of particular interest. This is due to the fact that the dynamics of decay in such regions (by analogy with the dynamics of phase transitions) demonstrates a high sensitivity to the parameters of the task. From a practical point of view, it means that such parameters can be determined from the experimental data with improved accuracy. In Ref. [7] studies of transitional dynamics are performed on the example of data analysis on the recently discovered 30Ar isotope.

2. Methodological work dedicated to study the "dineutron" decay was carried and reported in Ref. [11]. Interpretation of decays with the emission of two neutrons as a "dineutron" decay (and the decays with the emission of two protons as "diproton" decay) is quite a common approximation. Previously not discussed problems of such an approach were demonstrated in paper [11] and the methods of analysis of experimental data were criticized.

REFERENCES

[1] http://flerovlab.jinr.ru/flnr/accul\_2/motiv.html - Flerov laboratory website: Special scientific FLNR seminar on April 13, 2017 dedicated to the commissioning of the ACCULINNA-2 facility. Reports of S.А. Krupko, A.S. Fomichev and L.V. Grigorenko.

[2] http://radio1.news/news/podmoskovnyy-uchyenyy-predryek-konets-tablitsy-mendeleeva/?sphrase\_id=10642 - On the website of Radio1 (radio station in the Moscow region): May 31, 2017 interview with L.V. Grigorenko on the prospects of the radioactive isotope beams research development in Dubna.

[3] http://indico.jinr.ru/conferenceDisplay.py?confId=251 - A.S. Fomichev, "Commissioning of the ACCULINNA-2 fragment separator and its day-one experiments", 46th meeting of the PAC for Nuclear Physics, Dubna, June 15, 2017.

[4] http://wwwinfo.jinr.ru/jinrmag/pdf/17num25.pdf - In the materials of the JINR weekly newspaper June 15, 2017: A.S. Fomichev presents the ACCULINNA-2 facility and the research program for 2017-2018 to the members of the JINR Program Advisory Committee for Nuclear Physics.

[5] http://www.jinr.ru/posts/novye-gorizonty-v-fizike-tyazhelyh-ionov/ - JINR website: extended meeting of the RAS Council on Heavy Ion Physics on December 01, 2017 dedicated to the scientific program of the FLNR for the next seven-year period and for the period up to 2030. Reports of S.А. Krupko, A.S. Fomichev and L.V. Grigorenko.

[6] P. G. Sharov, A. S. Fomichev, A. A. Bezbakh, V. Chudoba, I. A. Egorova, M. S. Golovkov, T. A. Golubkova, A. V. Gorshkov, L. V. Grigorenko, G. Kaminski, A. G. Knyazev, S. A. Krupko, M. Mentel, E. Yu. Nikolskii, Yu. L. Parfenova, P. Pluchinski, S. A. Rymzhanova, S. I. Sidorchuk, R. S. Slepnev, S. V. Stepantsov, G. M. Ter-Akopian, and R. Wolski, “Search for 2p decay of the first excited state of 17Ne”, Physical Review C 96, 025807 (2017) [arXiv:1612.04697].

[7] X. Xu, I. Mukha, L.V. Grigorenko, C. Scheidenberger, L. Acosta, E. Casarejos, V. Chudoba, A.A. Ciemny, W. Dominik, J. Duenas-Diaz, V. Dunin, J.M. Espino, A. Estrade, F. Farinon, A. Fomichev, H. Geissel, T.A. Golubkova, A. Gorshkov, Z. Janas, G. Kaminski, O. Kiselev, R. Knobel, S. Krupko, M. Kuich, Yu.A. Litvinov, G. Marquinez-Duran, I. Martel, C. Mazzocchi, C. Nociforo, A.K. Orduz, M. Pfutzner, S. Pietri, M. Pomorski, A. Prochazka, S. Rymzhanova, A.M. Sanchez-Benitez, P. Sharov, H. Simon, B. Sitar, R. Slepnev, M. Stanoiu, P. Strmen, I. Szarka, M. Takechi, Y.K. Tanaka, H. Weick, M. Winkler, J.S. Winfield, M.V. Zhukov, “Spectroscopy of Excited States of unbound nuclei 30Ar and 29Cl”, Submitted to Physical Review C (2017) [arXiv:1710.05501].

[8] V. Chudoba for the EXPERT project, “The EXPERT project: part of the Super-FRS Experiment Collaboration”, Accepted to

JPCS.

[9] V. Eremin, D. Mitina, A. Fomichev, O. Kiselev, N. Egorov, I. Eremin, A. Shepelev, E. Verbitskaya, “Comparative studies of silicon detector degradation under irradiation by heavy ions and relativistic protons”, Journal of Instruments (2017) in print.

[10] D. Kostyleva, O. Kiselev, A. Bezbakh, V. Chudoba, V. Eremin, A. Fomichev, A. Gorshkov, S. Krupko, I. Mukha, I. Muzalevskii, C. Scheidenberger, P. Sharov for the EXPERT/Super-FRS Experiment Collaboration, “Study of the silicon detectors for time-of-flight measurements at the super-frs facility and expert experiments at FAIR”, Submitted to Acta Physica Polonica B.

[11] L.V. Grigorenko, J.S. Vaagen, M.V. Zhukov, “What is a dineutron? Exploring its manifestation and nature in two-neutron emission using a dynamical dineutron model”, Submitted to Physical Review C (2017) [arXiv:1711.08899]

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1.Шаров П.Г., Фомичев А.С., Безбах А.А., Худоба В., Егорова И.А., Голубкова Т.А., Горшков А.В., Григоренко Л.В., Каминьски Г., Князев А.Г., Крупко С.А., Ментел М., (Sharov P.G., Fomichev A.S., Bezbakh A.A., Chudoba V., Egorova I.A., Golovkov M.S., Golubkova T.A., Gorshkov A.V., Grigorenko L.V., Kaminski G., Knyazev A.G., Krupko S.A., Mentel M., Nikolskii E.Yu., Parfenova Yu.L.,

Pluchinski P., Rymzhanova S.A.)

Search for 2 p decay of the first excited state of 17NePHYSICAL REVIEW C (2017 г.)

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**17-12-01170**

Руководитель проекта

**Пенионжкевич Юрий Эрастович**

Название проекта

Экзотические ядра на границе нейтронной стабильности и реакции с ними

Вид конкурса

Конкурс 2017 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2017–2019**

**Год представления отчета**

**2017**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Проведены измерения полных сечений реакций взаимодействия 6,8He, 9,11Li с ядрами Si с использованием трансмиссионного метода (полупроводниковые и сцинтилляционные детекторы, входящие в установку МУЛЬТИ). Были проведены расчеты по определению эффективности регистрации продуктов ядерных реакций (нейтронов и гамма-квантов) с помощью программного комплекса GEANT4. Калибровка установки МУЛЬТИ показала высокую эффективность регистрации продуктов ядерных реакций, совпадающую с расчетной (около 60%).

Для вторичного пучка ядер 9Li была измерена функция возбуждения реакции взаимодействия 9Li с ядрами Si в широком диапазоне энергий (5 – 40 А МэВ) с использованием разработанного в группе оригинального трансмиссионного метода, основанного на регистрации энергетических

потерь в материале (dE) Si – детектора, выполняющего роль мишени. n- и γ- излучение регистрировалось 4pi-сцинтилляционным спектрометром и являлось тригером при регистрации факта произошедшей реакции. В реакции 9Li + Si обнаружено локальное повышение величины полного сечения в интервале энергий 10 - 30 АМэВ. В реакции 6He + Si также наблюдалось увеличение сечения в области энергий 10 – 20 АМэВ. Был проведен теоретический анализ на основе численного решения нестационарного уравнения Шредингера для внешних нейтронов ядер-снарядов. Предложенная в работе нестационарная модель показывает, что перераспределение внешних слабосвязанных нейтронов ядер 6He и 9Li в процессе столкновения изменяет реальную и мнимую части потенциала взаимодействия, что может являться причиной локального повышения полного сечения реакции. Это повышение наиболее заметно в области энергий, при которых относительная скорость ядер близка по величине к средней скорости внешних нейтронов в исследуемых легких слабосвязанных ядрах. Таким образом, структурные особенности легких слабосвязанных ядер оказывают непосредственное влияние на энергетическую зависимость полного сечения, и это влияние наиболее существенно при относительных скоростях, сравнимых со средней скоростью внешних нейтронов в ядрах 6Не и 9Li. Этот новый обнаруженный эффект требует дальнейшего изучения, как теоретического, так и экспериментального. В частности, было бы интересно исследовать другие комбинации снарядов и мишеней, например, использовать 12С или 27Al в качестве мишени, что позволит подтвердить или опровергнуть предположение о том, что обнаруженный эффект связан именно со структурой легкого ядра-снаряда. Эти исследования предполагается продолжить в течение 2018 года.

Эксперименты по определению вероятности нейтронного распада проводились с использованием разработанного и изготовленного участниками проекта уникального детектора нейтронов на основе 3Не – счетчиков. С его помощью были определены с высокой точностью вероятности нейтронного распада ядер у границы нейтронной стабильности в районе нейтронной оболочки с N=50 (82,83,84Ga (N=51,52,53). Для ядер 82,83,84Ga впервые обнаружены гамов- теллеровские резонансы и получены новые свидетельства проявления β-задержанных вероятностей нейтронного излучения. Подобный результат существования т.н. пигми-резонанса Гамова-Теллера был впервые что в области энергий возбуждения ниже гигантского гамов-теллеровского резонанса расположены так называемые пигми-резонансы.

Проведенный теоретический анализ показал, что пигми-резонансы являются коллективными зарядово-обменными возбуждениями и хорошо описываются как в самосогласованном микроскопическом подходе, так и в приближенном методе, использующем квазиклассические идеи. Ранее анализировалось проявление пигми-резонансов в силовых функциях бета-распада, где эти резонансы рассматривались как изобарические коллективные состояния.

Полученный результат важен для описания структуры ядер у границ нейтронной стабильности, а также для астрофизики при решении проблемы нуклеосинтеза во Вселенной. Работа проходила в сотрудничестве с учеными из Страсбургского университета (Франция), Института ядерной физики (Орсе, Франция), Манчестерского университета (Англия), и ЦЕРНа.

В совместных экспериментах с физиками в Техасе проведены пробные эксперименты по получению радиоактивного пучка 8B и изучению упругого рассеяния 8B на 208Pb. На циклотроне Явяскюльского университета в мае 2017 г. проведены эксперименты по измерению влияния кластеров и гало-структур возбужденных состояний на сечения реакций передачи.

На ускорительном комплексе радиоактивных пучков DRIBs в ЛЯР ОИЯИ были получены вторичные пучки 6Не и измерены сечения взаимодействия ядер 6Не в реакциях (6He + 45 Sc). Анализ полученных данных в рамках решения нестационарного уравнения Шредингера (TDSE) показал хорошее согласие расчетов с экспериментальными данными. Был сделан вывод о влиянии внешних нейтронов в 6Не на вероятность протекания реакции. Впервые в реакции 6He+197Au было обнаружено значительное увеличение сечения передачи нейтронов в глубокоподбарьерной области энергий.

В 2017 г. в международных конференциях приняли участие 8 человек, в частности: “Ядро 2017’, г. Алма-Ата, Казахстан - 4 человека, “Ядерные реакции со стабильными и радиоактивными пучками”, г. Варна, Болгария – 3 человека, “Ядерная астрофизика”, г. Катанья, Италия – 1 человек.

Ссылка на установку МУЛЬТИ: <http://flerovlab.jinr.ru/flnr/multi.html>

***на английском языке***

The measurement of the total cross sections for nuclear reactions 6,8He, 9,11Li + Si by the transmission method was performed (semiconductor and scintillation detectors included in the MULTI setup). Calculations were carried out to determine the efficiency of detection of nuclear reaction products (neutron and gamma-quanta) using the GEANT4 software package. The calibration of the MULTI setup showed a high efficiency of detection of nuclear reaction products coinciding with the calculated one (about 60%).

For the secondary beam of 9Li nuclei, the excitation function of the reaction of interaction of 9Li with Si nuclei in a wide energy range (5-40 A MeV) was measured using the original transmission method developed in the group based on recording the energy losses in the material (dE) of the Si target detector. In this case, n- and γ-radiation was detected by a 4pi scintillation spectrometer and was a trigger for event detection. In the 9Li + Si reaction, a local increase in the total cross section in the energy range 10–30 A MeV was observed. In the 6He + Si reaction, an increase in the cross section was also observed in the energy range 10 ± 20 A MeV. A theoretical analysis of this reaction was carried out on the basis of a numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation for external neutrons of projectile nuclei.

The time-dependent model proposed in the work shows that the redistribution of the external weakly bound neutrons of the 6He and 9Li nuclei in the process of collision changes the real and the imaginary parts of the interaction potential, which may cause a local increase in the total cross section of the reaction. This increase is most noticeable in the energy range at which the relative velocity of the nuclei is close in magnitude to the average velocity of external neutrons in the investigated weakly bound nuclei.

Thus, the structural features of light weakly bound nuclei have a direct influence on the energy dependence of the total cross section, and this influence is most significant at relative velocities comparable with the average velocity of external neutrons in the 6He and 9Li nuclei. This new discovered effect requires further study, both theoretical and experimental. In particular, it would be interesting to investigate other combinations of projectiles and targets, for example, to use 12C or 27Al as a target, which will confirm or disprove the assumption that the observed effect is related specifically to the structure of the light projectile nucleus. These studies are expected to continue during 2018.

Within the framework of this project, the neutron decay probability (β1n) of a number of nuclei in the region of neutron shell N = 50 (82,83,84Ga (N = 51,52,53)) was determined with high accuracy. Experiments to determine the probability of neutron decay were carried out using a unique neutron detector based on 3He counters developed and manufactured by the project participants. With this detector, the probabilities of neutron decay of nuclei near the neutron stability boundary in the region of the neutron shell N = 50 were determined. For 82,83,84Ga nuclei, Gamow-Teller resonances were discovered for the first time and new evidence of the manifestation of β-delayed probabilities of neutron radiation was obtained. A similar result of the existence of the so-called Gamow-Teller pygmy resonance was detected for the first time at Z = 36 and manifested itself up to 79Ni. It was shown that in the region of excitation energies below the giant Gamow-Teller resonance, the so-called pygmy resonances are located.

The theoretical analysis has shown that the pygmy resonances are collective charge-exchange excitations and are well described both in a self-consistent microscopic approach and in an approximate method using quasiclassical ideas. Previously, the manifestation of pygmy resonances in the strength functions of beta decay was analyzed where these resonances were considered as isobaric collective states.

The result obtained is important for describing the structure of nuclei at the boundaries of neutron stability, as well as for astrophysics in solving the problem of nucleosynthesis in the universe. The work was carried out in cooperation with scientists from Strasbourg University (France), the Institute of Nuclear Physics (Orsay, France), Manchester University (England), and CERN.

In joint experiments with physicists in Texas, test experiments were conducted to obtain a radioactive beam of 8B and to study the elastic scattering of 8B by 208Pb. In May 2017, experiments were conducted at the cyclotron of the University of Jyväskylä to measure the effect of clusters and halos structures of excited states on the cross sections of the transfer reactions.

Secondary 6He beams were obtained at the accelerator complex of radioactive beams DRIBs at FLNR JINR and the cross sections for the interaction of 6He nuclei in the reaction (6He + 45 Sc) were measured. An analysis of the data obtained within the time-dependent Schrödinger equation (TDSE) method showed good agreement between the calculations and the experimental data. A conclusion was made about the influence of external neutrons of 6He on the probability of the reaction. For the first time in the 6He + 197Au reaction, a significant increase in the neutron transfer cross section in the deep-subbarrier energy region was observed. In 2017, 8 people took part in international conferences, in particular: "Nucleus 2017", Alma-Ata, Kazakhstan - 4 people, "Nuclear reactions with stable and radioactive beams", Varna, Bulgaria - 3 people, "Nuclear Astrophysics", Catania, Italy - 1 person. MULTI: http://flerovlab.jinr.ru/flnr/multi.html

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Верней Д., Тестов Д., Ибрагим Ф., Пенионжкевич Ю., Розири Б., Смирнов В., Дидержан Ф., Фланаган К., Франко С., Кузнецова Е., Ли Р., Марш Б., Матеа И., Пай Х., Сокол Е., Стефан И., Сузуки Д. (D.Verney, D.Testov, F.Ibrahim, Yu.Penionzhkevich, B.Roussiere, V.Smirnov, F.Didierjean, K.Flanagan, S.Franchoo, E.Kuznetsova, R.Li, B.Marsh, I.Matea, H.Pai, E.Sokol, I.Stefan, D.Suzuki) Pygmy Gamow-Teller resonance in the N=50 region: New evidence from staggering of β-delayed neutron-emission probabilities Phys.Rev. C. (2017 г.)

2. Науменко М. А., Пенионжкевич Ю. Э., Самарин В. В., Скобелев Н.К. (Naumenko M. A.,

Penionzhkevich Yu. E., Samarin V. V., Skobelev N.K.) Neutron transfer in reactions with light weakly-bound nuclei Eurasian Journal of Physics and Functional Materials (2017 г.)

3. Пенионжкевич Ю. Э., Соболев Ю. Г., Самарин В. В., Науменко М. А. (Penionzhkevich Yu E, Sobolev Yu G, Samarin V V and Naumenko M A) Study of enhancement of total cross sections of reactions with 6He, 6,9Li nuclei Eurasian Journal of Physics and Functional Materials (2017 г.)

4. Пенионжкевич Ю. Э., Соболев Ю. Г., Самарин В. В., Науменко М. А. (Penionzhkevich Yu E, Sobolev Yu G, Samarin V V and Naumenko M A) Особенности полных сечений реакций со слабосвязанными ядрами 6He, 9Li. Ядерная Физика (2017 г.)

5. Соболев Ю. Г., Пенионжкевич Ю. Э., Азнабаев Д., Земляная Е. В., Иванов М. П., Кабдрахимова Г. Д., Кабышев А. М., Князев А.Г., Куглер А., Лашманов Н.А., Лукьянов К. В., Май А., Маслов В. A., Мендибаев К., Скобелев Н. К., Слепнев Р.C., Смирнов В. И. (Yu. G. Sobolev, Yu. E. Penionzhkevich, D. Aznabaev, M. P. Ivanov, G.D. Kabdrakhimova, A. M. Kabyshev, A.G.Knyazev, A. Kugler, N.A.Lashmanov, K. V. Lukyanov, A. Maj, V. A. Maslov, K. Mendibayev, N. K. Skobelev, R.S.Slepnev,V.V.Smirnov, D. Testov) "Experimental Study of the Energy Dependence of the Total Cross Section for the 6He + natSi and 9Li + natSi Reactions" Physics of Particles and Nuclei (2017 г.)

**ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ**

**КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ**

Номер проекта

**14-12-00920**

Руководитель проекта

**Бруданин Виктор Борисович**

Название проекта

Экспериментальный поиск когерентного рассеяния нейтрино на ядрах

Вид конкурса

Конкурс 2014 года «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами»

Срок исполнения проекта

**2014–2016**

**Год представления отчета**

**2014**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Целью настоящего проекта является детектирование когерентного рассеяния нейтрино на ядрах германия. В настоящем проекте поиск когерентного рассеяния нейтрино будет осуществляться на ядрах германия при помощи уникальных низкопороговых германиевых детекторов, разработанных в ОИЯИ (Дубна), в созданной низкофоновой установке с энергетическим порогом регистрации от ~300 эВ. Возможность выполнения эксперимента на Калининской атомной станции, что обеспечит поток антинейтрино более 5,4х1013 на см2 в секунду, открывает уникальный шанс в течение 3–5 лет, осуществить эксперимент по поиску когерентного рассеяния с чувствительностью достаточной для его наблюдения. Кроме того, нами будут выполнены работы по созданию и исследованию низкопороговых полупроводниковых детекторов из кадмий – цинк – теллура (CZT), материал, который обладает высокой тормозной способностью, низким тепловым шумом, работоспособностью при комнатной температуре, и детекторов на основе такого перспективного материала, как карбид кремния (SiC). Целью этих работ является разработка и создание новых детекторов с энергетическим порогом регистрации до 200 эВ и ниже, что откроет перспективу не только детектирования когерентного рассеяния нейтрино на ядрах, но и его изучения в деталях.

2014 год являлся первым годом выполнения проекта и основной задачей, полностью выполненной, стало проведения комплекса работ по созданию инфраструктуры эксперимента, частей установки, тестированию детекторов. В частности, разработаны и созданы системы активной защиты от космического излучения (мюонное вето) и антикомптоновская защиты на основе 12 NaI(Tl) сцинтилляционных детекторов. В низкофоновой лаборатории проведены исследования характеристик низкопороговых HPGe–детекторов, являющихся основой создаваемой установки, и собственного фона криостата. Выполнены комплексные измерения гамма, нейтронного и космического фона на Калининской АЭС (КАЭС) в лаборатории под реактором где будут проводиться измерения по поиску когерентного рассеяния нейтрино. Создано программное обеспечения для тестовых и методических измерений.

В целом проект развивается в соответствии с первоначально представленным планом. Все работы, запланированные на 2014 год полностью выполнены. Таким образом, первоначально поставленная цель проекта остается неизменной: С учетом возможности проведения основной фазы эксперимента на Калининской атомной станции, что обеспечит поток антинейтрино более 5,4х1013 на см2 в секунду, эксперимент имеет уникальный шанс в течение нескольких лет осуществить эксперимент по поиску когерентного рассеяния с чувствительностью достаточной для его наблюдения.

***на английском языке***

Aim of this project is observation of neutrino coherent scattering on Ge nuclei. In the project neutrino coherent scattering on germanium nuclei will be searched with using of the unique low-threshold germanium detectors developed by JINR (Dubna). The detectors will be placed into low-background setup that will provide an energy threshold of ~300 eV. The existing possibility to perform the experiment at Kalininskaya Nuclear Power Plant provides us with the antineutrino flux greater than 5.4х1013 1/(cm2 x sec.). This opens up a new unique possibility to perform the first experimental search of neutrino-nucleus coherent scattering during next 3–5 years. The sensitivity level is expected to be sufficient for observation of this process. In addition, we will work on creation and investigation of low-threshold semiconductor detectors made of cadmium-zinc-tellurium (CZT), that exhibits high stopping power, low thermal noise, workability at the room temperature. We will develop detectors made from such promising semiconductor as silicon carbide (SiC) as well. The aim of this work is the development and building of new detectors with an energy threshold of 200 eV and below. After first detection of the coherent scattering these detectors will be applied for further studying of the process in details.

2014 was the first year of project realization. The main goal was in carrying out of following works: creation of experimental infrastructure and parts of the setup as well as detector testing. All the objectives for the first year were fully completed. In particular, the systems of active shielding against cosmic rays (muon veto) and anticompton shielding based on 12 NaI(Tl) scintillators were designed and created. The analysis of characteristics of low-threshold HPGe detectors were carried out in the low background laboratory. These detectors are the basis of the produced setup. The measurements of cryostat's own background were also accomplished. The complex measurements of gamma, neutron and cosmic backgrounds were carried out on the territory of Kalinin Nuclear Power Plant in the laboratory under the reactor where the measurements on search for coherent scattering of neutrino will be made. The software for test and methodic measurements was created as well.

In general the project is developing according to original plan. All the works planned on 2014 are fully completed. Thus the original goal of the project remains the same. Taking into account the possibility for the first phase of the experiment to be conducted on Kalinin Nuclear Power Plant that would provide us with antineutrino flux of over 5,4х1013 1/cm2/s the experiment has a unique chance to realize for the first time in the history an experiment on search for coherent scattering with the sensitivity sufficient for its observing.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Грубчин Л., Гуров Ю.Б. , Затько Б., Розов C.В., Сандуковский В.Г., Якушев Е.А.

Характеристики детекторов на основе карбида кремния Приборы и техника эксперимента, Instruments and Experimental Techniques.

**Год представления отчета**

**2015**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Целью настоящего проекта является детектирование когерентного рассеяния нейтрино на ядрах германия. В настоящем проекте поиск когерентного рассеяния нейтрино будет осуществляться на ядрах германия при помощи уникальных низкопороговых германиевых детекторов, разработанных в ОИЯИ (Дубна), в созданной низкофоновой установке с энергетическим порогом регистрации от~300 эВ. Возможность выполнения эксперимента на Калининской атомной станции, что обеспечит поток антинейтрино более 5,4х1013 на см2 в секунду, открывает уникальный шанс в течение нескольких лет, осуществить эксперимент по поиску когерентного рассеяния с чувствительностью достаточной для его наблюдения. Кроме того, нами будут выполнены работы по созданию и исследованию низкопороговых полупроводниковых детекторов из кадмий – цинк – теллура (CZT), материал, который обладает высокой тормозной способностью, низким тепловым шумом, работоспособностью при комнатной температуре, и детекторов на основе такого перспективного материала, как карбид кремния (SiC). Целью этих работ является разработка и создание новых детекторов с энергетическим порогом регистрации до 200 эВ и ниже, что откроет перспективу не только детектирования когерентного рассеяния нейтрино на ядрах, но и его изучения в деталях.

Результаты первого года выполнения проекта, когда был выполнен комплекса работ по созданию инфраструктуры эксперимента, частей установки, тестированию детекторов, были существенно дополнены в текущем году созданием собственно установки с детекторами, имеющей характеристики (фон, энергетический порог) необходимые для начала поиска когерентного рассеяния нейтрино. В низкофоновой лаборатории проведены исследования характеристик низкопороговых HPGe–детекторов, являющихся основой создаваемой установки, и собственного фона криостата. Выполнены комплексные измерения гамма, нейтронного и космического фона на Калининской АЭС (КАЭС) в лаборатории под реактором где будут проводиться измерения по поиску когерентного рассеяния нейтрино. Создано программное обеспечения для тестовых и методических измерений.

В целом проект развивается в соответствии с первоначально представленным планом. Все работы, запланированные на 2015 год, полностью выполнены. Таким образом, первоначально поставленная цель проекта остается неизменной: С учетом возможности проведения основной фазы эксперимента на Калининской атомной станции, что обеспечит уникально большой поток антинейтрино более 5,4х1013 на см2 в секунду, эксперимент имеет реальный шанс в течение нескольких лет осуществить регистрацию когерентного рассеяния нейтрино на ядрах германия.

***на английском языке***

Aim of this project is observation of neutrino coherent scattering on Ge nuclei. In the project neutrino coherent scattering on germanium nuclei will be searched with using of the unique low-threshold germanium detectors developed by JINR (Dubna). The detectors will be placed into low-background setup that will provide an energy threshold of ~300 eV. The existing possibility to perform the experiment at Kalinin Nuclear Power Plant (KNPP) provides us with the antineutrino flux greater than 5.4х1013 1/(cm2 x sec.). This opens up a new unique possibility to perform the first experimental search of neutrino-nucleus coherent scattering during next several years. The sensitivity level is expected to be sufficient for observation of this process. In addition, we will work on creation and investigation of lowthreshold semiconductor detectors made of cadmium-zinc-tellurium (CZT), that exhibits high stopping power, low thermal noise, workability at the room temperature. We will develop detectors made from such promising semiconductor as silicon carbide (SiC) as well. The aim of this work is the development and building of new detectors with an energy threshold of 200 eV and below. After first detection of the coherent scattering these detectors will be applied for further studying of the process in details. After successful realization of works planned for first year of the project, namely: creation of experimental infrastructure and parts of the setup as well as detector testing, in the current year main part of the experiment: the low background setup has been completed. The achieved energy thresholds and preliminary values of the experimental background are adequate in order to start further commissioning of the setup with all acquisition chain and the veto systems at the KNPP experimental site. The analysis of characteristics of low-threshold HPGe detectors were carried out in the low background laboratory. These detectors are the basis of the produced setup. The measurements of cryostat's own background were also accomplished. The complex measurements of gamma, neutron and cosmic backgrounds were carried out on the territory of KNPP in the laboratory under the reactor where the measurements on search for coherent scattering of neutrino will be made. The software for test and methodic measurements was created as well.

In general the project is developing according to original plan. All the works planned on 2015 are fully completed. Thus the original goal of the project remains the same. Taking into account the possibility for the first phase of the experiment to be conducted on KNPP that would provide us with antineutrino flux of over 5.4х1013 1/(cm2 x sec.). the experiment has a unique chance to realize for the first time in the history an experiment on search for coherent scattering with the sensitivity sufficient for its observing.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Brudanin V., Belov V., Egorov V., Filosofov D., Fomina M., Gurov Yu., Lubashevskiy A., Medvedev D., Rozova I., Rozov S, Sandukovsky V., Timkin V., Yakushev E., Zhitnikov I.

Status of νGeN experiment at the Kalininskaya nuclear power plant for detection coherent neutrino Ge nucleus elastic scattering LXV Internation al conference «Nucleus 2015» New horizons in nuclear physics, nuclear engineering, femto- and nanotechnologies, Book of abstracts (2015);

2. Belov V., Brudanin V., Egorov V., Filosofov D., Fomina M., Gurov Yu., Korotkova L., Lubashevskiy A., Medvedev D.,Pritula R., Rozova I., Rozov S., Sandukovsky V., Timkin V., Yakushe E., Yurkowsk J., Zhitnikov I.

The νGeN Experiment at the Kalinin Nuclear Power Plant Journal of Instrumentation (JINST) (2015 г.) WOS SCOPUS РИНЦ.

**Год представления отчета**

**2016**

**Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов**

***на русском языке***

Целью настоящего проекта является детектирование когерентного рассеяния нейтрино на ядрах германия. В настоящем проекте поиск когерентного рассеяния нейтрино будет осуществляться на ядрах германия при помощи уникальных низкопороговых германиевых детекторов, разработанных в ОИЯИ (Дубна), в созданной низкофоновой установке с энергетическим порогом регистрации от ~300 эВ. Возможность выполнения эксперимента на Калининской атомной станции, что обеспечивает поток антинейтрино более 5,4х1013 на см2 в секунду, открывает уникальный шанс в течение нескольких лет, осуществить эксперимент по поиску когерентного рассеяния с чувствительностью достаточной для его наблюдения. Кроме того, нами выполняются работы по созданию и исследованию низкопороговых полупроводниковых детекторов из кадмий - цинк - теллура (CZT), материал, который обладает высокой тормозной способностью, низким тепловым шумом, работоспособностью при комнатной температуре, и детекторов на основе такого перспективного материала, как карбид кремния (SiC). Целью этих работ является разработка и создание новых детекторов с энергетическим порогом регистрации до 200 эВ и ниже, что откроет перспективу не только детектирования когерентного рассеяния нейтрино на ядрах, но и его изучения в деталях.

После успешной реализации первого года выполнения проекта, когда был выполнен комплекс работ по созданию инфраструктуры эксперимента, частей установки, тестированию детекторов; и второго года выполнения проекта, когда была создана собственно установка с детекторами, имеющая характеристики (фон, энергетический порог) необходимые для начала поиска когерентного рассеяния нейтрино и были проведены исследования характеристик низкопороговых HPGe–детекторов, являющихся основой установки, и собственного фона криостата в низкофоновой подземной лаборатории; в третьем году было выполнена следующая часть эксперимента - установка доставлена и собрана под третьим энергоблоком Калининской АЭС (КАЭС). Установка успешно введена в эксплуатацию, ведется набор данных.

В целом проект развивается в соответствии с первоначально представленным планом. Все работы, запланированные на 2016 год, полностью выполнены. Таким образом, первоначально поставленная цель проекта остается неизменной: С учетом возможности проведения основной фазы эксперимента на Калининской атомной станции, что обеспечивает уникально большой поток антинейтрино более 5,4х1013 на см2 в секунду, эксперимент имеет реальный шанс в течение нескольких лет набора данных осуществить регистрацию когерентного рассеяния нейтрино на ядрах германия.

***на английском языке***

Aim of this project is observation of neutrino coherent scattering on Ge nuclei. In the project neutrino coherent scattering on germanium nuclei will be searched with using of the unique low-threshold germanium detectors developed by JINR (Dubna). The detectors will be placed into low-background setup that will provide an energy threshold of ~300 eV. The existing possibility to perform the experiment at Kalinin Nuclear Power Plant (KNPP) provides us with the antineutrino flux greater than 5.4х1013 1/(cm2 x sec). This opens up a new unique possibility to do the first experimental search of neutrinonucleus coherent scattering during next several years. The sensitivity level is expected to be sufficient for observation of this process. In addition, we are doing R&D on creation and investigation of low-threshold semiconductor detectors made of cadmium-zinc-tellurium (CZT), that exhibits high stopping power, low thermal noise, workability at the room temperature. We will develop detectors made from such promising semiconductor as silicon carbide (SiC) as well. The aim of this work is the development and building of new detectors with an energy threshold of 200 eV and below. After first detection of the coherent scattering these detectors will be applied for further studying of the process in details.

After successful realization of works planned for first year of the project, namely: creation of experimental infrastructure and parts of the setup as well as detector testing; It was followed by successful realization of works planned for second year of the project, namely: main part of the experiment: the low background setup has been completed. The achieved energy thresholds and preliminary values of the experimental background were found to be adequate in order to start further commissioning of the setup with all acquisition chain and the veto systems at the KNPP experimental site. The analysis of characteristics of low-threshold HPGe detectors were carried out in the low background laboratory. These detectors are the basis of the produced setup. The measurements of cryostat's own background were also accomplished.

Finally in 2016 the setup has been delivered to KNPP experimental site after final tests in Dubna. Commissioning runs of data taking are ongoing. In general the project is developing according to original plan. All the works planned on 2016 are fully completed. Thus the original goal of the project remains the same. Taking into account that the experiment is conducted on KNPP that provides the antineutrino flux of over 5,4х1013 1/cm2/s the experiment has a unique chance to realize for the first time in the history an experiment on search for coherent scattering with the sensitivity sufficient for its observing.

**Перечень публикаций за год по результатам проекта**

1. Якушев Е., Розов С., Дрохлянски А., Философов Д., Каланинова З., Тимкин В., Пономарев Д. (Yakushev E., Rozov S., Drokhlyansky A., Filosofov D., Kalaninova Z., Timkin V., Ponomarev D.)

Sensitive neutron detection method using delayed coincidence transitions in existing iodinecontaining detectors arxiv, submitted to Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A (2016).