

Стабильные магнитные изотопы – изотопы, обладающие ядерным спином и ядерным магнитным моментом, например, ^{13}C , ^{25}Mg , ^{29}Si , ^{31}P , ^{67}Zn и др., позволяют регистрировать спектры ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и используются в радиоспектроскопии. В стабильных и в свободных радикалах – «обломках» молекул – магнитные моменты атомных ядер взаимодействуют с магнитными моментами неспаренных электронов. Это взаимодействие называется сверхтонким взаимодействием (СТВ). Оно приводит к расщеплению линий электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и позволяет идентифицировать пространственную и электронную структуру радикалов [1]. В радикальных парах и в ион-радикальных парах СТВ индуцирует синглет-триплетную конверсию, что изменяет реакционную способность радикалов по отношению к клеточной и внеклеточной рекомбинации в жидкостях [2]. В последствии было обнаружено и доказано влияние магнитных моментов атомных ядер изотопов ^{25}Mg , ^{67}Zn и др. на скорости ферментативных процессов *in vitro* и *in vivo* [3-5].

Спиновый гамильтониан сверхтонких взаимодействий $\hat{H}_{\text{сн}}$ предполагает взаимодействие ядерного спина \hat{I} лишь с одним электронным спином $S = 1/2$ с константой взаимодействия a

$$\hat{H}_{\text{сн}} = a \cdot \hat{S} \cdot \hat{I}.$$

На первый взгляд, эта форма гамильтониана \hat{H} не допускает сверхтонких взаимодействий в диамагнитных молекулах с заполненными электронными оболочками и с суммарным электронным спином $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 = 0$. Однако антисимметрия полной волновой функции $\Psi(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$ диамагнитных молекул требует отдельного описания взаимодействий отдельных электронов с ядерным спином \hat{I} . При этом «полный» гамильтониан сверхтонких взаимодействий должен включать и спиновые и пространственные переменные \hat{r}_1 и \hat{r}_2 и изначально иметь вид [1]

$$\hat{H} = \left(\frac{8\pi}{3}\right) g_n \beta_n g_e \beta_e [\hat{S}_1 \delta(\hat{r}_1 - \hat{r}_A) + \hat{S}_2 \delta(\hat{r}_2 - \hat{r}_A)]. \quad (1)$$

Здесь \hat{r}_A – координаты ядра магнитного изотопа, $\delta(\hat{r}_i - \hat{r}_A)$ – δ -функция. Вычисления матричных элементов гамильтониана (1)

$$\langle \Psi_T(\hat{r}_1, \hat{r}_2) | \hat{H} | \Psi_S(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \rangle$$

с пространственными волновыми функциями синглетного $\Psi_S(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = 2^{-1/2} \varphi_1(\hat{r}_1) \varphi_1(\hat{r}_2) |S\rangle$ и триплетного $\Psi_T(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = 2^{-1/2} \{\varphi_1(\hat{r}_1) \varphi_2(\hat{r}_2) - \varphi_2(\hat{r}_1) \varphi_1(\hat{r}_2)\} |T_{\pm,0}\rangle$ состояний доказывают, что для системы из двух электронов с антисимметричными волновыми функциями сверхтонкое взаимодействие способно переводить систему из синглетного в триплетное состояние, а спиновый гамильтониан должен иметь вид

$$\hat{H}_{\text{СТВ}} = a_1 (\hat{S}_1 - \hat{S}_2) \hat{I}, \quad (2)$$

где «новая» константа СТВ

$$a_1 = (8\pi/3) g \beta g_n \beta_n \varphi_u(\hat{r}_A) \varphi_g(\hat{r}_A).$$

Доказано, что спиновый гамильтониан сверхтонкого взаимодействия (2) способен «смешивать» синглетные и триплетные состояния в диамагнитных молекулах и молекулярных комплексах и индуцировать синглет триплетную конверсию в активных центрах ферментов в магнитных полях, соответствующих квазипересечению триплетных и синглетных термов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Керрингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. – Москва. Мир, 1969. – 448 с.
2. Buchachenko A.L. Beauty and Fascination of Science. – Singapore. Springer Nature Ltd, 2020. – 188 p
3. Buchachenko A.L. Magnetic Isotope Effect in Chemistry and Biochemistry. – New York: Nova Science, 2009. – 149 p.
4. Letuta U.G., Berdinskiy V.L. Magnetosensitivity of bacteria *E. coli*: Magnetic isotope and magnetic field effects // Bioelectromagnetics. – 2017. – № 38- P. 581–591.
5. Magnetic isotope effect of magnesium ^{25}Mg on *E. coli* resistance to antibiotics / U.G. Letuta, A.S. Vekker, T.A. Kornilova et. al. // Doklady Biochem. Biophys. – 2016. – № 469. – С. 281–283.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ИНДЕКСОВ ХАУНСФИЛДА ОТ ПАРАМЕТРОВ ТРЕХМЕРНОЙ ПЕЧАТИ ПЛАСТИКОВЫХ ОБРАЗЦОВ

Бушмина Е.А.¹, Зубкова Ю.А.¹, Милойчикова И.А.^{1,2}

Научный руководитель: Стучебров С.Г.¹, к.ф.-м.н., доцент

¹Томский политехнический университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30

²Научно-исследовательский институт онкологии Томского НИМЦ РАН, 634009, г. Томск,
пер. Кооперативный, 5
E-mail: eab60@tpu.ru

На сегодняшний день лечение онкологических заболеваний проводят при помощи лучевой терапии. Одними из устройств для получения гамма-излучения, которое используется в лучевой терапии, являются гамма-терапевтические установки [1]. Для достижения эффективного результата лечения существует необходимость в проведении дозиметрической верификации плана облучения. Данные процедуры обычно проводят с использованием фантомов, изготовленных из тканеэквивалентного материала [1].

Особое внимание приковано к индивидуальным гетерогенным фантомам, которые позволят более точно проводить контроль облучения. Однако создание таких фантомов требует решения ряда задач, таких как скорость и точность изготовления из тканеэквивалентных материалов. Отвечая данным требованиям, индивидуальные фантомы предлагается создавать посредством аддитивных технологий [2]. Такой подход позволяет воссоздать анатомию человека с помощью 3D-моделирования [2].

Как известно индексы Хаунсфилда являются одной из основных характеристик, используемых при планировании облучения. Они определяют ослабление рентгеновского излучения по отношению к дистиллированной воде. Для имитации разных органов и тканей тела человека с заданными значениями индексов Хаунсфилда необходимо не только выбрать тканеэквивалентный материал, но и определить параметры печати для каждого элемента. Одним из таких параметров является коэффициент экструзии.

Коэффициент экструзии – это скорость продавливания пластика через формирующее отверстие 3D-принтера и его количество. Данный параметр печати позволяет плавно регулировать плотность заполнения объекта материалом. В данной работе была исследована зависимость индексов Хаунсфилда объектов, изготовленных методом послойного наплавления из ПЛА пластика (полилактид), от коэффициента экструзии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-10014).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khan F.M., Gibbons J.P. Khan's the physics of radiation therapy. – Fifth edition. – Lippincott Williams & Wilkins, 2014. – 572 p.

Красных А.А. и др. Оценка возможности изготовления материалов, пригодных для устройств быстрого прототипирования, с заданными КТ-индексами // Ядерная физика и инжиниринг, 2017. – Т. 8. – № 1. – С. 91-95.2.

СОЗДАНИЕ ФАНТОМА ДЛЯ ВЕРИФИКАЦИИ ПРОЦЕДУРЫ ОБЛУЧЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ МЕДИЦИНСКОГО ПУЧКА ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ ИСТОЧНИКА ⁶⁰Со

Зубкова Ю.А., Бушмина Е.А., Черепенников Ю.М.

Научный руководитель: Стучебров С.Г., к.ф.-м.н., доцент

Томский политехнический университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30

E-mail: yaz8@tpu.ru

Одним из инструментов лучевой терапии являются гамма-терапевтические установки для дистанционного облучения. Медицинский пучок создается радионуклидным источником ⁶⁰Со. Средняя энергия такого пучка составляет 1,25 МэВ [1].

В подобных установках источник представлен в виде цилиндра, диаметр выходного отверстия которого составляет 1-2 см. Такой источник не является геометрически точечным и вокруг него возникает геометрическая полутень [1, 2]. Система формирования поля облучения для стандартного гамма-терапевтического аппарата представляет собой набор коллиматоров, конструкция которых позволяет создавать только прямоугольные поля. Для формирования полей более сложных форм, повторяющих контур новообразования, используются стандартные свинцовые блоки, устанавливаемые вручную [1, 2]. Как следствие применение таких блоков требует обязательной верификации, как точности их установки, так и сформированного ими дозового поля вблизи критических органов.

В связи с тем, что в основе проведения процедур лучевой терапии лежит главный принцип в доставке максимальной дозы ионизирующего излучения на злокачественные клетки опухоли с минимальной лучевой нагрузкой на окружающие здоровые клетки организма, возникает необходимость в проведении дозиметрических процедур контроля и верификации планов облучения на гамма-терапевтических установках. Стандартные водные или пластинчатые фантомы являются гомогенными и упрощают геометрию тела пациента [1]. Решением данной проблемы может стать применение гетерогенных тканеэквивалентных дозиметрических фантомов.

Для создания подобных фантомов было предложено использовать технологии трехмерной печати [3]. Для реализации этого решения в данной работе было проведено преобразование томографических