

**Выписка из решения секции №3 Ученого Совета
НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ о подаче цикла работ
С.В. Степанова, В.М. Бякова, О.В. Илюхиной, П.С. Степанова «Взаимодействие
растворенного кислорода с атомом позитрония в жидких средах»
на конкурс ИТЭФ по разделу «Лучшие экспериментальные работы»
Протокол № 1 от 24 февраля 2021 г.**

Краткая аннотация работ

В последние годы исследования взаимодействия атома позитрония (Ps) с молекулярным кислородом (O₂), растворенным в водных средах и других органических жидкостях, приобретет актуальность в связи с открывающимися возможностями детектирования злокачественных опухолей в организме человека.

В представленном цикле работ исследовано взаимодействие атома Ps с молекулярным кислородом, растворенным в воде, изооктане, циклогексане и изопропаноле. Для вариации содержания в жидкостях растворенного O₂, они барботировались аргоном, кислородом и воздухом. Временные аннигиляционные спектры измерялись на двухдетекторном позитронном спектрометре, собранном из блоков наносекундной электроники фирмы Ortec. В качестве источника позитронов использовался изотоп Ti-44 активностью 7 МБк.

Для интерпретации позитронных временных аннигиляционных спектров нами предложен новый механизм образования позитрония, включающий его нахождение в квазисвободном состоянии. Эта форма Ps образуется по окончании термализации внутритрековых e⁻ и e⁺ и предшествует конечному состоянию атома Ps в «нанопузырьке». Для количественного описания судьбы Ps вплоть до его аннигиляции разработан (в рамках среды ROOT/RooFit) новый программный пакет для фитирования аннигиляционных спектров. В отличие от традиционного разложения спектров на набор убывающих во времени экспонент, наша программа позволяет фитировать спектры с использованием более реалистичных физических моделей протекания радиолитических процессов в треке позитрона. Использование этой программы позволило впервые определить по-отдельности значения констант скорости реакций окисления атома позитрония (Ps + O₂ => e⁺ + O₂⁻) и его спиновой конверсии (орто-Ps ⇌ пара-Ps) вследствие взаимодействия с молекулами O₂.

Данное исследование создает основу для нового метода диагностики раковых опухолей. На современных позитронных томографах будет возможно не только определять пространственное местоположение аннигиляции e⁺, но и одновременно измерять времена жизни атомов Ps. Именно эта величина непосредственно связана с локальной концентрацией растворенного O₂, которая, в свою очередь, коррелирует с развитием процесса канцерогенеза.

Научная и практическая значимость

Известно, что концентрация растворенного кислорода в злокачественных опухолях гораздо ниже, чем в здоровых тканях. Поэтому раковые клетки постоянно живут в условиях кислородного голодания. С другой стороны, растворенный кислород эффективно сокращает время жизни атома орто-Ps. Во-первых, кислород способен окислять позитроний (отнимать у него электрон и превращать в свободный позитрон). Во-вторых, поскольку молекула O₂ парамагнитна (т.е. обладает магнитным моментом), она способна индуцировать процесс спиновой орто-пара-конверсии позитрония. Оба эти эффекта уменьшают время жизни Ps. Это означает, что времена жизни Ps в здоровых тканях будут меньше, чем в злокачественных.

Выявленная нами корреляция времени жизни Ps и концентрации растворенного O₂ может быть использована для разработки *нового, дополнительного метода детектирования опухолей* на базе современных позитронных эмиссионных томографов. В настоящее время они позиционируют опухоли посредством определения линий разлета аннигиляционных фотонов (то есть фактически по области локализации радиофармпрепарата, содержащего e⁺ эмиттер). На основе проведенных нами исследований можно модифицировать современные ПЭТ сканеры и определять с их помощью времена жизни e⁺ и Ps до аннигиляции (при условии использования в качестве радиофармпрепарата с изотопом Sc-44). Тем самым появляется возможность использовать дополнительный метод позиционирования раковых опухолей.

Оценка новизны результатов

В представленных на конкурс работах изучены внутритрековые физико-химические процессы, ответственные за корреляцию содержания O_2 и временем жизни Ps в жидкостях. Мы показали, что для корректной интерпретации полученных данных необходимо учесть, что атом Ps на протяжении своей жизни изменяет свое состояние. Необходимо учитывать существование начального (но недостаточного долгоживущего - десятки пикосекунд!) состояния атома позитрония (квазисвободный Ps), в течение которого он «подыскивает» себе подходящее место для локализации и образования нанопузырька. Только с учетом квазисвободного Ps возможно непротиворечивое описание данных как временных, так и доплеровских экспериментов.

Данный подход к интерпретации аннигиляционных спектров был положен в основу разработанного нашим коллективом программного обеспечения, написанного в среде ROOT/RooFit. В результате оказалось возможным отказаться от традиционного экспоненциального разложения временных аннигиляционных спектров (на набор убывающих экспонент), и фитировать спектры, используя более реалистичные модели физико-химических процессов, протекающих в треках позитронов. Использование данной программы позволило:

- во всех исследованных жидкостях определить по-отдельности константы скорости реакций окисления позитрония растворенным кислородом ($Ps + O_2 \Rightarrow e^+ + O_2^-$) и спиновой конверсии Ps (орто-Ps \Leftrightarrow пара-Ps), которая тоже инициируется молекулами O_2 ;
- устранить расхождения в интерпретации данных, полученных на временных и доплеровских аннигиляционных спектрометрах.

Перечисленные результаты в целом создают необходимый задел разработки нового, дополнительного метода диагностики раковых опухолей с использованием современных позитронных томографов. Над проблемой конкретной реализации данной идеи в настоящее время уже работают несколько научных групп в Японии [см. K. Shibuya et al., “Oxygen sensing ability of positronium atom for tumor hypoxia imaging” Communications Physics 3, 173 (2020) <https://doi.org/10.1038/s42005-020-00440-z>]

Творческий вклад авторов:

Ф.И.О. автора	Творческий вклад
Степанов Сергей Всеволодович	Настройка позитронного аннигиляционного спектрометра, проведение измерений времени жизни позитронов в жидкостях, интерпретация результатов
Бяков Всеволод Михайлович	Постановка задачи, развитие теоретических моделей поведения позитронов жидких средах
Илюхина Ольга Владимировна	Пробоподготовка, барботирование различных газов и их предварительная очистка, работа на аннигиляционном спектрометре
Степанов Петр Сергеевич	Разработка нового программного обеспечения для фитирования аннигиляционных спектров, интерпретация результатов

Секция №3 Ученого Совета рекомендует представленные материалы к выдвижению на конкурс научно-исследовательских работ ИТЭФ 2020 г. по разделу «Лучшие экспериментальные работы». Результаты голосования: присутствовали – 5 чел., «за» - 5 чел., «против» - 0 чел., «воздержались» - 0 чел.

Председатель секции №3 Ученого Совета,
зам. директора НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ,
кандидат физ.-мат. наук

/ Т.В. Кулевой /

Ученый секретарь секции №3
кандидат физ.-мат. наук

/ М.М. Кац /