

## Реферат

цикла научно-исследовательских работ

С.В. Степанова, В.М. Бякова, О.В. Илюхиной, П.С. Степанова

«Взаимодействие растворенного кислорода с атомом позитрония в жидких средах»

### Краткая аннотация работ

В последние годы исследования взаимодействия атома позитрония (Ps) с молекулярным кислородом ( $O_2$ ), растворенным в водных средах и органических жидкостях, приобретает актуальность в связи с открывающимися возможностями детектирования злокачественных опухолей в организме человека.

В представленном цикле работ исследовано взаимодействие атома позитрония (Ps) с молекулярным кислородом, растворенным в воде, изооктане, циклогексане и изопропаноле. Для вариации содержания растворенного  $O_2$  изучаемые жидкости барботировались аргоном, кислородом и воздухом. 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, включающий в рассмотрение квазисвободное состояние атома Ps. Эта форма Ps образуется по окончании термализации  $e^+$  и внутритрековых  $e^-$ , но предшествует конечному состоянию атома Ps, локализованного в «пузырьке».

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 радиолитических процессов, протекающих в позитронном треке. Использование этой программы позволило впервые определить по-отдельности значения констант скорости реакций окисления атома позитрония ( $Ps + O_2 \Rightarrow e^+ + O_2^-$ ) и его спиновой конверсии (орто-Ps  $\Leftrightarrow$  пара-Ps) вследствие взаимодействия с молекулами  $O_2$ .

Данное исследование создает основу для развития нового метода диагностики раковых опухолей. На современных позитронных томографах (Total Body PET) будет возможно не только определять пространственное местоположение аннигиляции  $e^+$ , но и одновременно измерять времена жизни атомов Ps (при использовании изотопа  $44Sc$  в качестве источника  $e^+$ ). Именно эта величина непосредственно связана с локальной концентрацией растворенного  $O_2$ , 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  $O_2$  парамагнитна (т.е. обладает магнитным моментом), она способна индуцировать процесс спиновой конверсии позитрония. Оба эти эффекта уменьшают время жизни Ps в жидкостях. Это означает, что время жизни Ps в здоровых тканях будет меньше, чем в злокачественных.

Выявленная нами корреляция времени жизни Ps и концентрации растворенного  $O_2$  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). Однако современные ПЭТ сканеры способны определять и времена жизни  $e^+$  и Ps до аннигиляции [Phys.

Med. Biol. 64 (2019) 055017 <https://doi.org/10.1088/1361-6560/aafe20>]. Тем самым появляется возможность использовать дополнительный метод позиционирования раковых опухолей.

### Оценка новизны результатов

В представленных на конкурс работах изучено влияние  $O_2$  на время жизни Ps в жидкостях, а также исследованы внутритрековые физико-химические процессы, ответственные за эту корреляцию. Мы показали, что для корректной интерпретации данных по аннигиляции позитронов в жидких средах необходимо учесть, что атом Ps на протяжении своей жизни изменяет свое состояние. Поэтому необходимо принимать во внимание существование начального, но достаточного 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 состояния 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), а 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 данными экспериментов 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	Публикации
Степанов Сергей Всеволодович	Настройка позитронного аннигиляционного спектрометра, проведение измерений времени жизни позитронов в жидкостях, интерпретация результатов	1, 2
Бяков Всеволод Михайлович	Постановка задачи, развитие теоретических моделей поведения позитронов жидких средах	1, 2
Илюхина Ольга Владимировна	Пробоподготовка, барботирование различных газов и их предварительная очистка, работа на аннигиляционном спектрометре	1, 2
Степанов Петр Сергеевич	Разработка нового программного обеспечения для фитирования аннигиляционных спектров, интерпретация результатов	1



Степанов С.В.