Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова

Изложены основные результаты, которые приводят к пониманию двойственной природы химической связи в двухатомной молекуле бериллия в основном состоянии $X_1\Sigma_g^+$. Показано, что атомы бериллия ковалентно связаны на низколежащих колебательных уровнях энергии, тогда как на более высоких они связаны силами Ван дер Ваальса. Высокоточные неэмпирические (*ab initio*) квантово-механические расчеты Be_2 привели к разработке модифицированной расширенной потенциальной функции осциллятора Морзе, воспроизводящей все двенадцать колебательных уровней энергии. Двойственная природа химической связи в Be_2 подтверждается наличием острого угла на притягивающей ветви кривой потенциала основного состояния. Более того, было обнаружено, что релятивистские поправки Дугласа–Кролла–Гесса также показывают наличие острого угла на зависимости потенциала от межъядерного расстояния. Разница между экстраполированными и вычисленными энергиями взаимодействия с многоссылочной конфигурацией в зависимости от межъядерного расстояния также показывает особую точку в этой же области. Представлен расчет колебательно-вращательного спектра связанных состояний димера бериллия в основном состоянии для модифицированной расширенной потенциальной функции осциллятора Морзе и для функции, полученной со слейтеровскими орбиталями. Особое внимание уделено расчетам комплексных уровней энергий колебательно-вращательных метастабильных состояний и длин рассеяния, выполненным впервые. Также впервые получены теоретические оценки верхних и нижних энергий колебательно-вращательных уровней связанных и метастабильных состояний. Такие расчеты важны для дальнейших экспериментов по лазерной спектроскопии димера бериллия и моделирования его приповерхностной диффузии в связи с известным многофункциональным использованием сплавов бериллия в инновационных технологиях электронной, космической и ядерной промышленности, включая проект ИТЭР.

Mitin A. V., Gusev A. A., Chuluunbaatar G., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Derbov V. L., Luong H. L. Dual Nature of Chemical Bond and Vibration–Rotation Spectrum of the Be_2 Molecule in the Ground $X_1\Sigma_g^+$ State // Chem. Mater. Sci.: Research Findings. 2025. V. 2. P. 100–133; https://doi.org/10.9734/bpi/cmsrf/v2/4945.

Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies

The review outlines the main results that lead to understanding the dual nature of the chemical bond in the diatomic beryllium molecule in the ground $X_1\Sigma_g^+$ state. It is shown that beryllium atoms are covalently bound at low-lying vibrational energy levels, while at higher ones they are bound by van der Waals forces. High-precision (*ab initio*) quantum mechanical calculations of Be_2 resulted in the development of a modified expanded Morse oscillator potential function that contains all twelve vibrational energy levels. The dual nature of the chemical bond in Be_2 is evidenced as a sharp corner on the attractive branch of the ground state potential curve. Moreover, it is found that the Douglas–Kroll–Hess relativistic corrections also show a sharp corner when presented in dependence on the internuclear separation. The difference between the extrapolated and calculated energies of multireference configuration interaction in dependence on the internuclear separation also exhibits a singular point in the same region. The calculation of the vibrational–rotational spectrum of the bound states of beryllium dimer in the ground state for the modified expanded Morse oscillator potential function and for the function obtained with Slater-type orbitals is considered. Special attention is paid to the first calculations of metastable vibrational–rotational complex-valued energy levels and scattering lengths, along the first theoretical estimations of upper and lower border limits for the calculated vibrational–rotational energy levels of bound and metastable states. Such calculations are important for further experiments on the laser spectroscopy of beryllium dimer and for the modeling of its near-surface diffusion in connection with the well-known multifunctional use of beryllium alloys in innovative technologies of electronic, space and nuclear industries, including the ITER project.

Mitin A. V., Gusev A. A., Chuluunbaatar G., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Derbov V. L., Luong H. L. Dual Nature of Chemical Bond and Vibration–Rotation Spectrum of the Be_2 Molecule in the Ground $X_1\Sigma_g^+$ State // Chem. Mater. Sci.: Research Findings. 2025. V. 2. P. 100–133; https://doi.org/10.9734/bpi/cmsrf/v2/4945.

Квазиупругое рассеяние является важнейшим методом изучения взаимного влияния сложной ядерной структуры и динамики реакции. Различные формы квазиупругих сечений демонстрируют специфические особенности связей со структурами или каналами реакции. Для решения уравнений метода связанных каналов с комплексными потенциалами, описывающих реакции систем с массивными ядрами, разработаны комплексы программ, реализующие метод конечных элементов (МКЭ) высокого порядка. Показано, что МКЭ и метод *R*-матрицы более стабильны, чем часто используемый модифицированный метод Нумерова, и позволяют включать больше колебательных и вращательных связей. Расчеты реакций ^{48}Ti + ^{208}Pb и ^{51}V + ^{248}Cm показали, что многофононные и высокоспиновые состояния значительно сглаживают распределения барьеров, улучшая согласие с экспериментальными данными. Эти результаты получены в сотрудничестве с ЛТФ, Китайским институтом атомной энергии, Институтом математики и цифровой технологии МАН (Монголия) и Свободного университета Брюсселя (Бельгия).

Wen P.W., Chuluunbaatar O., Descouvemont P., Gusev A.A., Lin C.J., Vinitsky S.I. Role of Multi-Phonon and High-Spin States on the Quasi-Elastic Barrier Distributions of Massive Systems // Phys. Lett. B. 2025. V. 863. P. 139383.

Представлен метод восстановления энергетического спектра нейтронов по результатам измерений многошаровым спектрометром Боннера. Метод основан на решении системы интегральных уравнений Фредгольма 1-го рода с использованием регуляризации Тихонова и разложении спектра по базису смещенных полиномов Лежандра. Для получения оптимального решения предложен алгоритм выбора параметра регуляризации и количества полиномов. Спектры были восстановлены для помещений вблизи установки ИРЕН ОИЯИ в диапазоне значений энергии от 10^{-8} до 63,1 МэВ. Для полученных спектров оценены эффективная мощность дозы и мощность амбиентного эквивалента дозы. Проведено сравнение с методом статистической регуляризации (программа Reconst).

Chizhov K., Beskrovnaya L., Chizhov A. Neutron Spectrum Unfolding Method Based on Shifted Legendre Polynomials, Its Application to the IREN Facility // Phys. Part. Nucl. Lett. 2025. V. 22, No. 2. P. 337–340; https://link.springer.com/article/10.1134/S154747712470239X#citeas.

Quasi-elastic scattering is a crucial method for studying the mutual influence of a complex nuclear structure and reaction dynamics. Different shapes of quasi-elastic cross sections exhibit specific features of couplings to structures or reaction channels. To solve coupled channel equations with complex-valued potentials describing the reactions of massive nuclei, program complexes that implement the finite element method (FEM) of high accuracy were developed. The FEM and *R*-matrix methods are demonstrated to be more stable than the widely used modified Numerov method and allow one to include more vibrational and rotational couplings. Calculations of the reactions ^{48}Ti + ^{208}Pb and ^{51}V + ^{248}Cm show that multiphonon and high-spin states significantly smooth the barrier distributions, improving the agreement with experimental data. The results are obtained in collaboration with BLTP JINR, the China Institute of Atomic Energy, the Institute of Mathematics and Digital Technology of MAS (Mongolia), and Université Libre de Bruxelles (Belgium).

Wen P.W., Chuluunbaatar O., Descouvemont P., Gusev A.A., Lin C.J., Vinitsky S.I. Role of Multi-Phonon and High-Spin States on the Quasi-Elastic Barrier Distributions of Massive Systems // Phys. Lett. B. 2025. V. 863. P. 139383.

A method for unfolding the neutron energy spectrum from the results of measurements with a Bonner multisphere spectrometer is presented. The method is based on solving the system of Fredholm integral equations of the 1st kind using the Tikhonov regularization and on decomposing the spectrum into shifted Legendre polynomials. To obtain the optimal solution, an algorithm for selecting the regularization parameter and the number of polynomials is proposed. The spectra are reconstructed for rooms near the IREN facility at JINR in the energy range from 10^{-8} to 63.1 MeV. The effective dose rate and the ambient dose equivalent rate are estimated for the obtained spectra. The results are compared with the statistical regularization method (Reconst software).

Chizhov K., Beskrovnaya L., Chizhov A. Neutron Spectrum Unfolding Method Based on Shifted Legendre Polynomials, Its Application to the IREN Facility // Phys. Part. Nucl. Lett. 2025. V. 22, No. 2. P. 337–340; https://link.springer.com/article/10.1134/S154747712470239X#citeas.

Сотрудники ЛИТ разрабатывают веб-сервис MOSTLIT — инструмент для автоматизации обнаружения в клеточных ядрах радиационно-индуцированных фокусов (РИФ) и последующего анализа их параметров. Сервис призван оптимизировать обработку экспериментальных данных, получаемых в ходе радиобиологических исследований, предоставляя исследователям удобный и эффективный инструментарий для анализа РИФ. Разработка ведется совместно с коллегами из ЛРБ ОИЯИ, государственного университета «Дубна» и ФМБЦ им. А. И. Бурназяна ФМБА России.

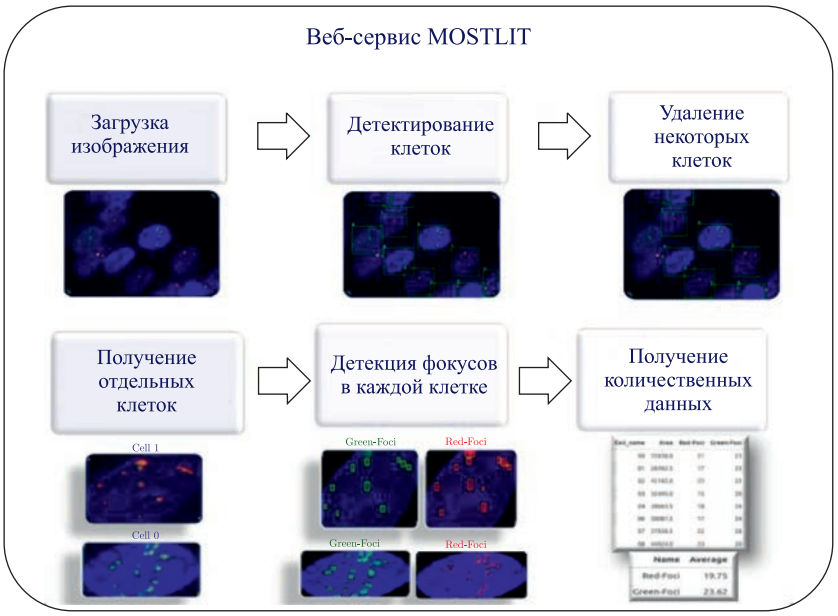
Для обнаружения РИФ на флуоресцентных изображениях MOSTLIT использует двухэтапный алгоритм, основанный на методах компьютерного зрения и глубокого обучения. Такой подход позволяет значительно ускорить обработку данных, свести к минимуму ошибки, связанные с человеческим фактором, и получить изображения отдельных клеток с выявленными фокусами. Кроме того, веб-сервис отображает исходные изображения с пронумерованными клетками и аналитическую информацию, такую как площадь клеток, количество РИФ в каждой клетке и др. Все результаты доступны для скачивания в удобном текстовом формате, что обеспечивает гибкость и совместимость с различными программными средствами статистической обработки данных, а также предоставляет возможность скачивания проанализированного изображения с отмеченными фокусами. Разработка MOSTLIT ориентирована на растущие потребности ученых в анализе повреждений ДНК. Благодаря масштабируемой архитектуре сервиса разработчики способны расширять его функционал на основе обратной связи от пользователей. Такой итеративный подход к разработке обеспечивает долгосрочную актуальность и эффективность сервиса для научного сообщества. Веб-сервис разработан и развернут на базе экосистемы ML/DL/HPC гетерогенной платформы HybriLIT и доступен на сайте http://mostlit.jinr.ru для зарегистрированных пользователей, подключенных к сети ОИЯИ.

Shadmehri S., Bezhanyan T., Bondarev M., Streltsova O. I., Zuev M. I., Chigasova A., Osipov A., Vorobyeva N., Osipov A. N. A Deep Learning Model for Automated Quantification of DNA Repair Foci in Somatic Mammalian Cells // Phys. Part. Nucl. 2025. V. 56, No. 6.

MLIT researchers are developing the MOSTLIT web service, a tool to automate the detection of radiation-induced foci (RIFs) in cell nuclei and subsequently analyze their parameters. The service is designed to optimize the processing of experimental data obtained during radiobiological studies, providing researchers with convenient and effective analysis tools. The team is working in collaboration with colleagues from LRB JINR, Dubna State University, and the Federal Medical Biophysical Center (Burnasyan SRC-FMBC FMBA).

To detect RIFs in fluorescent images, MOSTLIT uses a two-step algorithm based on computer vision and deep learning techniques. This approach enables to significantly speed up data processing, minimize human errors, and obtain images of individual cells with identified foci. In addition, the web service provides source images with numbered cells and analytical information, such as cell area, the number of RIFs in each cell, etc. All results are available for download in a convenient text format, ensuring flexibility and compatibility with various statistical data processing software. The ability to download the analyzed image with marked foci is also provided. The creation of MOSTLIT is focused on the growing needs of scientists in DNA damage analysis. Thanks to the service's scalable architecture, developers can expand its functionality based on user feedback. This iterative approach to development ensures the long-term relevance and effectiveness of the service for the scientific community. The web service is developed and deployed on top of the ML/DL/HPC ecosystem of the HybriLIT heterogeneous computing platform and is available at https://mostlit.jinr.ru for registered users connected to the JINR network.

Shadmehri S., Bezhanyan T., Bondarev M., Streltsova O. I., Zuev M. I., Chigasova A., Osipov A., Vorobyeva N., Osipov A. N. A Deep Learning Model for Automated Quantification of DNA Repair Foci in Somatic Mammalian Cells // Phys. Part. Nucl. 2025. V. 56, No. 6.

Схема работы веб-сервиса MOSTLIT

MOSTLIT web service operation scheme