

ISSN 1817-3020 (Print)
ISSN 2542-193X (Online)

ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Новая серия

Серия: Физика

2023

Том 23

Выпуск 2



IZVESTIYA OF SARATOV UNIVERSITY
PHYSICS



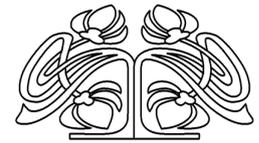
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского»

ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Новая серия

Серия Физика, выпуск 2

Продолжение «Известий Императорского Николаевского Университета» 1910–1918, «Ученых записок СГУ» 1923–1962,
«Известий Саратовского университета. Новая серия» 2001–2004



Научный журнал
2023 Том 23
ISSN 1817-3020 (Print)
ISSN 2542-193X (Online)
Издается с 2005 года

СОДЕРЖАНИЕ

Научный отдел

Радиофизика, электроника, акустика

Мазин А. С., Падалинский М. М., Болдырев Н. А., Старосек А. В.
Моделирование рассеивающих свойств блочных метаповерхностей в диапазоне 16–25 ГГц и сравнение с экспериментальными результатами 102

Оптика и спектроскопия. Лазерная физика

Конюхов А. И., Мельников Л. А. Фазочувствительное усиление оптического сигнала в боковых полосах модуляционной неустойчивости при одночастотной накачке 112

Биофизика и медицинская физика

Selifonov A. A., Rykhlov A. S., Tuchin V. V. *Ex vivo* study of the kinetics of ovarian tissue optical properties under the influence of 40%-glucose [Селифонов А. А., Рыхлов А. С., Тучин В. В. *Ex vivo* Исследование кинетики оптических свойств тканей яичников под действием 40%-глюкозы] 120

Сагайдачный А. А., Волков И. Ю., Цой М. О., Фомин А. В., Майсков Д. И., Антонов А. В., Залетов И. С., Скрипаль А. В. Оценка пространственно-временной неоднородности двумерных изображений на примере фотоплетизмографической визуализации гемодинамики 128

Verveyko D. V., Verisokin A. Yu., Lagosha S. V., Brazhe A. R. Competitive bidirectional pathways of vascular tone regulation via arachidonic acid metabolites [Вервейко Д. В., Верисокин А. Ю., Лагоса С. В., Браже А. Р. Конкуренентные двунаправленные пути регуляции тонуса сосудов воздействием метаболитов арахидоновой кислоты] 141

Mordovina E. A., Berdenkova V. A., Bakal A. A., Tsyupka D. V., Kokorina A. A., Podkolodnaya Yu. A., Goryacheva O. A., Goryacheva I. Yu. Fluorescent nanosized PAMAM dendrimers: One-step formation of a bright blue fluorophore on terminal groups and its optical properties [Мордовина Е. А., Берденкова В. А., Бакал А. А., Цюпка Д. В., Кокорина А. А., Подколodная Ю. А., Горячева О. А., Горячева И. Ю. Флуоресцентные наноразмерные дендримеры ПАМАМ: одностадийное образование ярко-синего флуорофора на концевых группах и его оптические свойства] 150

Физика атомного ядра и элементарных частиц

Gontchar I. I., Chushnyakova M. V., Khmyrova N. A. Systematics of the Coulomb barrier characteristics resulting from MZY nucleon-nucleon forces for reactions with heavy ions [Гончар И. И., Чушнякова М. В., Хмырова Н. А. Систематика параметров кулоновских барьеров, вычисленных с использованием МЗУ нуклон-нуклонных сил, в реакциях с тяжёлыми ионами] 157

Физика конденсированного состояния вещества

Давидович М. В., Глухова О. Е. Корреляционные соотношения для графена и его тепловое излучение 167

Нанотехнологии, наноматериалы и метаматериалы

Короневский Н. В., Иноземцева О. А., Сергеева Б. В., Ушаков А. В., Сергеев С. А. Исследование процесса перекристаллизации микрочастиц карбоната кальция, выращенных на волокнах поликапролактона, с помощью сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции 179

Методический отдел

Цой В. И. Необратимость времени и обратимость движения в динамических уравнениях физики 188

Журнал «Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия «Физика»» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Запись о регистрации СМИ ПИ № ФС77-76653 от 26 августа 2019 г.

Журнал включен в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (специальности: 1.3.3, 1.3.4, 1.3.5, 1.3.6, 1.3.11, 1.3.19, 1.5.2, 2.2.2).

Журнал индексируется Scopus, RSCI (ВАК категория К1), DOAJ

Подписной индекс издания 36015. Подписку на печатные издания можно оформить в Интернет-каталоге ГК «Урал-Пресс» (ural-press.ru). Журнал выходит 4 раза в год. Цена свободная. Электронная версия находится в открытом доступе (fizika.sgu.ru)

Директор издательства

Бучко Ирина Юрьевна

Редактор

Батицева Татьяна Федоровна

Художник

Соколов Дмитрий Валерьевич

Редактор-стилист

Агафонов Андрей Петрович

Верстка

Ковалева Наталья Владимировна

Технический редактор

Каргин Игорь Анатольевич

Корректор

Агафонов Андрей Петрович

Адрес учредителя, издателя

и издательства (редакции):

410012, Саратов, ул. Астраханская, 83

Тел.: +7(845-2) 51-29-94, 51-45-49,

52-26-89

E-mail: publ@sgu.ru, izdat@sgu.ru

Подписано в печать 22.06.23.

Подписано в свет 30.06.23.

Формат 60 × 84 1/8.

Усл. печ. л. 11.2 (12.0).

Тираж 100 экз. Заказ 53-Т.

Отпечатано в типографии

Саратовского университета.

Адрес типографии:

410012, Саратов, Б. Казачья, 112А

© Саратовский университет, 2023



ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Журнал публикует на русском и английском языках научные статьи по физике, содержащие новые результаты исследований, статьи учебно-методического характера, содержащие инновационную компоненту, статьи по методологии разделов физической науки, статьи, отражающие хронику научных мероприятий и важных событий в жизни физического сообщества.

Материалы, ранее опубликованные или представленные для публикации в другие журналы, к рассмотрению не принимаются. Рекомендуемый объем статьи – до 25 страниц текста, включая рисунки, таблицы и список литературы. На русском языке статья содержит: УДК, заглавие, инициалы и фамилии авторов, название их места работы, электронный адрес авторов, аннотацию (200–250 слов), ключевые слова, текст благодарности и ссылки на гранты, список литературы.

На английском языке необходимо продублировать: заглавие, инициалы (имя – полностью) и фамилии авторов, структурированную аннотацию (250–600 слов), ключевые слова, список литературы (references). Для каждого автора указать ORCID.

Текст должен быть набран и напечатан через 1,5 интервала на бумаге формата А4 с полями 2,5 см, шрифт Times New Roman, размер шрифта текста – 14.

Текст статьи должен быть подписан всеми авторами.

Журнал публикует краткие сообщения – небольшие по объему статьи, которые имеют безусловную новизну и значимость. Эти статьи публикуются в короткие сроки. Объем краткого сообщения ограничен 10 машинописными страницами (14 кеглем через 1.5 интервала), включая рисунки, таблицы и список литературы. Язык статьи для краткого сообщения – английский.

Структура краткого сообщения на английском языке: заглавие, инициалы (имя – полностью) и фамилии авторов, электронный адрес авторов, аннотация (100–200 слов), ключевые слова, текст благодарности и ссылки на гранты, список литературы. Для каждого автора нужно указать ORCID. На русском языке необходимо продублировать заглавие, инициалы и фамилии авторов, название их места работы, электронный адрес авторов, аннотацию, ключевые слова, УДК.

Все рукописи, поступившие в редколлегия и соответствующие профилю журнала, проходят рецензирование, а затем редколлегия принимает решение о возможности их опубликования.

Плата за публикацию рукописей не взимается. Более подробно с правилами для авторов и порядком рецензирования можно ознакомиться на сайте журнала: <http://fizika.sgu.ru>

Адрес редколлегии серии: 410012, Саратов, ул. Астраханская, 83, СГУ имени Н. Г. Чернышевского, Институт физики

Тел./факс: +7 (8452) 52-27-05

E-mail: fizik@sgu.ru

Website: <https://fizika.sgu.ru>

CONTENTS

Scientific Part

Radiophysics, Electronics, Acoustics

- Mazinov A. S., Padalinsky M. M., Boldyrev N. A., Starosek A. V.** Simulation of scattering properties of modular metasurfaces in the 16–25 GHz range and comparison with experimental results 102

Optics and Spectroscopy. Laser Physics

- Konyukhov A. I., Melnikov L. A.** Phase-sensitive amplification of an optical signal in the modulation instability sidebands with single-frequency pump 112

Biophysics and Medical Physics

- Selifonov A. A., Rykhlov A. S., Tuchin V. V.** *Ex vivo* study of the kinetics of ovarian tissue optical properties under the influence of 40%-glucose 120

- Khivintsev Y. V., Vysotskii S. L., Dzhumaliev A. S., Filimonov Y. A.** Assessment of spatiotemporal heterogeneity of two-dimensional images on the example of photoplethysmographic imaging of hemodynamics 128

- Verveyko D. V., Verisokin A. Yu., Lagosha S. V., Brazhe A. R.** Competitive bidirectional pathways of vascular tone regulation via arachidonic acid metabolites 141

- Mordovina E. A., Berdenkova V. A., Bakal A. A., Tsyupka D. V., Kokorina A. A., Podkolodnaya Yu. A., Goryacheva O. A., Goryacheva I. Yu.** Fluorescent nanosized PAMAM dendrimers: One-step formation of a bright blue fluorophore on terminal groups and its optical properties 150

Physics of Atomic Nucleus and Elementary Particles

- Gontchar I. I., Chushnyakova M. V., Khmyrova N. A.** Systematics of the Coulomb barrier characteristics resulting from M3Y nucleon-nucleon forces for reactions with heavy ions 157

Physics of Condensed Matter

- Davidovic M. V., Glukhova O. E.** Correlation relations for graphene and its thermal radiation 167

Nanotechnologies, Nanomaterials and Metamaterials

- Koronevskiy N. V., Inozemtseva O. A., Sergeeva B. V., Ushakov A. V., Sergeev S. A.** Investigation of the process of recrystallization calcium carbonate microparticles grown on polycaprolactone nanofibers using scanning electron microscopy and x-ray diffraction 179

Methodological Part

- Tsoy V. I.** Irreversibility of time and reversibility of motion in dynamic equations of physics 188



**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА
«ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. НОВАЯ СЕРИЯ.
СЕРИЯ: ФИЗИКА»**

Главный редактор

Короновский Алексей Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Заместители главного редактора

Тучин Валерий Викторович, доктор физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН (Саратов, Россия)

Никитов Сергей Аполлонович, доктор физ.-мат. наук, академик РАН (Москва, Россия)

Ответственный секретарь

Скрипаль Анатолий Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Члены редакционной коллегии:

Аникин Валерий Михайлович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Бабков Лев Михайлович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Вадивасова Татьяна Евгеньевна, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Вениг Сергей Борисович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Виницкий Сергей Ильич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Дубна, Россия)

Горохов Александр Викторович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Самара, Россия)

Давидович Михаил Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Дюбуа Арно, Ph.D., профессор Университета Париж-Сакле (Сент-Обен, Франция)

Захарова Анна Сергеевна, доктор наук по физике (Dr. Habil), профессор Берлинского технического университета (Берлин, Германия)

Ларин Кирилл Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор Хьюстонского университета (Хьюстон, США)

Мельников Леонид Аркадьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Модельский Иосиф, Ph.D., профессор Варшавского Технологического университета (Варшава, Польша)

Нефёдов Игорь Сергеевич, доктор физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник Университета Аалто (Хельсинки, Финляндия)

Пирогов Юрий Андреевич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Москва, Россия)

Сербино Роберто, Ph.D., профессор Миланского университета (Милан, Италия)

Скрипаль Александр Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Сухоруков Глеб Борисович, кандидат физ.-мат. наук, профессор Университета

Королевы Марии (Лондон, Великобритания)

Филимонов Юрий Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Хлебцов Николай Григорьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Чигринов Владимир Григорьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор Гонг Конгского университета науки и технологии (Гонг Конг, Китай)

Шараевский Юрий Павлович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

**EDITORIAL BOARD OF THE JOURNAL
“IZVESTIYA OF SARATOV UNIVERSITY. PHYSICS”**

Editor-in-Chief – Aleksey A. Koronovskii (Saratov, Russia)

Deputy Editors-in-Chief – Valery V. Tuchin (Saratov, Russia))

Sergey A. Nikitov (Moscow, Russia)

Executive Secretary – Anatoly V. Skripal (Saratov, Russia)

Members of the Editorial Board:

Valery M. Anikin (Saratov, Russia)

Lev M. Babkov (Saratov, Russia)

Roberto Cerbino (Milan, Italy)

Vladimir G. Chigrinov (Hong Kong, China)

Michael V. Davidovich (Saratov, Russia)

Arnaud Dubois (Saint-Aubin, France)

Yuri A. Filimonov (Saratov, Russia)

Alexander V. Gorokhov (Samara, Russia)

Anna S. Zakharova (Berlin, Germany)

Nikolai G. Khlebtsov (Saratov, Russia)

Kirill V. Larin (Houston, USA)

Igor S. Nefedov (Helsinki, Finland)

Leonid A. Melnikov (Saratov, Russia)

Joseph Modelski (Warsaw, Poland)

Yuri A. Pirogov (Moscow, Russia)

Yuri P. Sharaevsky (Saratov, Russia)

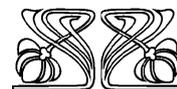
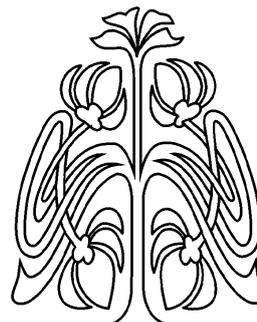
Alexander V. Skripal (Saratov, Russia)

Gleb B. Sukhorukov (London, UK)

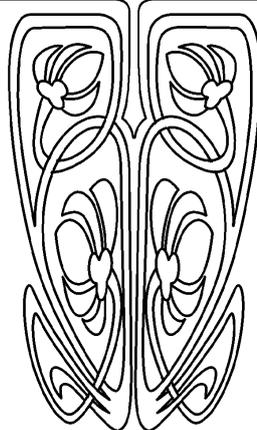
Tatyana E. Vadvasova (Saratov, Russia)

Sergey I. Vinitzky (Dubna, Russia)

Sergey B. Venig (Saratov, Russia)



**РЕДАКЦИОННАЯ
КОЛЛЕГИЯ**





РАДИОФИЗИКА, ЭЛЕКТРОНИКА, АКУСТИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 102–111
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 102–111
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-102-111>, EDN: SXWPVG

Научная статья
УДК 537.874

Моделирование рассеивающих свойств блочных метаповерхностей в диапазоне 16–25 ГГц и сравнение с экспериментальными результатами

А. С. Мазинов[✉], М. М. Падалинский, Н. А. Болдырев, А. В. Старосек

Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, Физико-технический институт, Россия, 295007, Республика Крым, г. Симферополь, пр. Вернадского, д. 4

Мазинов Алим Сеит-Аметович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой радиофизики и электроники, mazinovas@cfuv.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8015-8841>, Author ID: 754027

Падалинский Михаил Михайлович, специалист кафедры радиофизики и электроники, padalinskii@icloud.com, <https://orcid.org/0000-0001-9691-4066>, Author ID: 1174357

Болдырев Николай Алексеевич, аспирант кафедры радиофизики и электроники, kolyaboldyrev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1804-4784>

Старосек Александр Викторович, старший преподаватель кафедры радиофизики и электроники, starosekav@cfuv.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9688-7598>, Author ID: 1055717

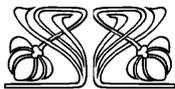
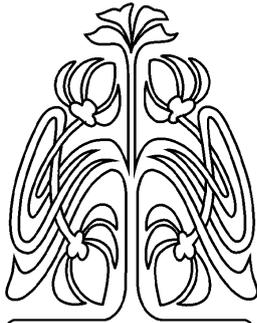
Аннотация. Метаповерхности – это поверхности, состоящие из элементарных резонаторов, переизлучающих падающие волны СВЧ-диапазона. Изменяя параметры и размещение этих резонаторов, можно настраивать электрические свойства метаповерхностей в целом. Это позволяет получить ряд практически важных характеристик, труднодостижимых при использовании обычных ослабляющих покрытий, и потому перспективных в задачах экранирования электронных устройств и ослабления отражённого сигнала. Поскольку возможных конфигураций резонаторов много, для эффективного сравнительного анализа необходимы численные эксперименты. Объектом данного исследования являются метаповерхности, состоящие из полосковых прямоугольных резонаторов, расположенных на диэлектрической подложке в шахматном порядке в двух конфигурациях. Задачей исследования было получение диаграмм рассеяния в численных экспериментах и сравнение их с реальными структурами.

В работе проводится компьютерное моделирование взаимодействия метаповерхностей с СВЧ полем, с последующим сравнением с результатами эксперимента с реальными структурами. Для моделирования использовался пакет CST Studio с использованием *time domain solver*. Расчёты проводились для нескольких частот в диапазоне 16–25 ГГц.

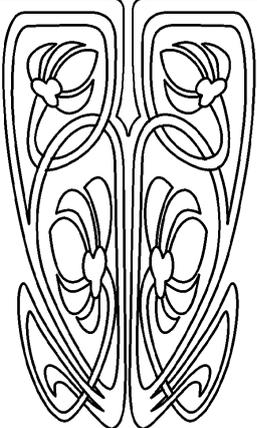
Полученные результаты показывают, что величина нормальной составляющей отраженной электромагнитной волны падает при приближении частоты падающего излучения к резонансной. Также наблюдаются боковые лепестки, величина которых зависит от частоты. Диаграммы рассеяния, полученные на реальных образцах, показывают те же характерные особенности, а имеющиеся различия объясняются физическими особенностями приемной антенны, а также наличием дифракционных явлений.

Обе рассмотренные структуры продемонстрировали высокие показатели рассеяния падающей волны, что наглядно демонстрирует перераспределение центрального лепестка на диаграммах. Сравнение показало, что промоделированные метаструктуры имеют схожие тенденции с экспериментальными диаграммами.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, пакет CST, диаграмма рассеяния, электромагнитное поле, СВЧ, метаповерхность, электромагнитные волны



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-22-20126) и региона Крым.

Для цитирования: Мазинов А. С., Падалинский М. М., Болдырев Н. А., Старосек А. В. Моделирование рассеивающих свойств блочных метаповерхностей в диапазоне 16–25 ГГц и сравнение с экспериментальными результатами // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 102–111. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-102-111>, EDN: SXWPVG

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Simulation of scattering properties of modular metasurfaces in the 16–25 GHz range and comparison with experimental results

A. S. Mazinov[✉], M. M. Padalinsky, N. A. Boldyrev, A. V. Starosek

V. I. Vernadsky Crimean Federal University, Physical-Technical Institute, 4 Prospekt Vernadskogo, Simferopol 295007, Republic of Crimea, Russia

Alim S. Mazinov, mazinovas@cfuv.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8015-8841>, Author ID: 754027

Mikhail M. Padalinsky, padalinskii@icloud.com, <https://orcid.org/0000-0001-9691-4066>, Author ID: 1174357

Nikolay A. Boldyrev, kolyaboldyrev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1804-4784>

Aleksandr V. Starosek, starosekav@cfuv.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9688-7598>, Author ID: 1055717

Abstract. Background and Objectives: Metasurfaces are coatings consisting of elementary resonators that reemit incident UHF electromagnetic waves. By varying the parameters and arrangement of these resonators, it is possible to tune the electrical properties of the metasurface as a whole. This produces a number of practically important characteristics that are difficult to achieve with conventional attenuation coatings, and therefore prospective in the tasks of shielding of electronic devices and attenuation of the reflected signal. As there are many possible configurations of resonators, numerical experiments are needed for an effective comparative analysis. We investigate metasurfaces consisting of rectangular stripline resonators arranged on a dielectric substrate in a checkerboard pattern in two configurations. The aim of the study is to obtain scattering diagrams in numerical experiments and compare them with real structures. **Materials and Methods:** In this paper a computer simulation of the interaction of metasurfaces with the microwave radiation in open space is carried out using the CST Studio package with a time domain solver. Calculations were performed for several frequencies in the range of 16 to 25 GHz. Experiments were then carried out with real structures at the same frequencies, using a bistatic method of measurements. The structures, with single resonators measuring 2×4.2 mm matching the frequency range, consisted of etched copper-plated FR4 sheets overlaid on a metal plate. **Results:** The results show that the value of the normal component of the reflected electromagnetic wave decreases as the incident frequency approaches the resonance frequency. Also, side lobes, with a frequency-dependent magnitude, are observed. The scattering diagrams obtained with real samples show the same characteristic features with differences caused by physical particularities of the receiving antenna as well as the presence of diffraction effects. Both structures examined have shown high incident wave scattering, which is clearly indicated by the redistribution of the central lobe in diagrams. Comparison has shown that the simulated metasurfaces have similar patterns to the experimental diagrams. **Conclusion:** The comparative analysis has demonstrated a satisfactory fit of the simulation to the experiment. Further studies with structures of this type are planned in the future. It may be noted that the CST Studio package has worked well and will be used in future studies.

Keywords: computer simulation, packet CST, scatter diagrams, electromagnetic waves, microwaves, metasurfaces

Acknowledgements: The study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-22-20126) and Crimea region grant.

For citation: Mazinov A. S., Padalinsky M. M., Boldyrev N. A., Starosek A. V. Simulation of scattering properties of modular metasurfaces in the 16–25 GHz range and comparison with experimental results. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 102–111 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-102-111>, EDN: SXWPVG

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Метаповерхности (МП) – особые структуры, представляющие собой поверхности, состоящие из элементарных резонаторов различного типа, которые при взаимодействии с СВЧ диапазоном переизлучают падающие волны определенным образом [1–3]. Изменяя относительную ориентацию зазоров или смещения соседних центров многослойных анизотропных структур, можно настроить взаимодействия ближнего поля между ними, что будет влиять на конечные свойства метаповерхности в целом [4–6]. Использование данных структур позволяет получить ряд практически важных характеристик, которые в некоторых случаях труднодостижимы при

использовании обычных ослабляющих покрытий, например, способность данных структур к формированию отрицательных электрических и магнитных проницаемостей, которые возникают вследствие эффекта деструктивной интерференции [7, 8].

Кроме того, МП обладают компактностью, высокой вариативностью их комбинаций, а также низкой стоимостью и простотой изготовления, что обуславливает их большую популярность в последнее время [2, 9].

Объектом нашего исследования стали метаповерхности, состоящие из полосковых резонаторов, расположенных на диэлектрической подложке. В качестве метода исследования было



выбрано компьютерное моделирование с дальнейшим проведением эксперимента и сопоставлением полученных результатов. Цель нашей работы – получение диаграмм рассеяния для представленных метаструктур.

1. Принцип построения анизотропных метаповерхностей

При создании топологии метаповерхности был использован блочный принцип формирования матрицы МП, частным случаем которого и являются МП с различными ориентациями элементарных проводящих резонаторов. Элементы матрицы располагаются поочередно в шахматном порядке. Тем самым наборы из четырех располагающихся рядом элементов формируют между собой «противофазные» блоки. Такая схема расположения ячеек матрицы обеспечивает работу деструктивной интерференции, что ведет к заметному снижению отраженной от структуры ЭМ волны [10, 11].

Для эксперимента были выбраны два типа модельных структур (МС): 1) вертикально и горизонтально ориентированные диполи (МС-1) (рис. 1, а); 2) вертикально и диагонально (45° влево) ориентированные диполи (МС-2) (рис. 1, б).

Вышеописанные МС выполнены на подложке FR-4 толщиной 1.5 мм, которая, в свою очередь, расположена на металлической пластине толщиной 1 мм. Толщина прямоугольных резонаторов из меди составляла 16 мкм. Матрица метаповерхности состоит из 16 одинарных ячеек, каждая из которых имеет размер 18×18 мм. Количество вертикальных резонаторов на одинарной ячейке равняется 9 шт., а на наклонных – 7 шт. Наклонные элементы повернуты

на 45° . Геометрические параметры резонаторов 2.0×4.2 мм были выбраны исходя из четвертьволновых размеров для частоты 20.5 ГГц, средней для рассматриваемого диапазона, и представлены на рис. 2.

Моделирование метаповерхностей проводилось в пакете CST Studio. Для расчета использовался «Вычислитель во временной области (Time domain solver)» [12], который моделирует распространение электромагнитного поля во времени и пространстве. С его помощью рассчитывается передача энергии между портами или другими источниками возбуждения или свободным пространством. Данный вычислитель подходит для моделирования большинства ВЧ задач: коннекторов, полосковых линий, антенн и прочего, позволяя получить результаты во всем частотном диапазоне за один вычислительный цикл с помощью преобразования Фурье [13]. Также нам необходимо было учитывать ограниченные вычислительные ресурсы, пропорционально зависящие от размеров структуры.

Вычислитель во временной области основан на технике конечного интегрирования (Finite Integration Technique, FIT), которая представляет собой схему дискретизации уравнений Максвелла и алгоритма их решения [14–16]. Данный подход является более общим случаем метода конечных разностей во временной области и эффективен в моделировании электромагнитных явлений [17]. Моделирование электромагнитного поля производится с применением пошаговой схемы с перешагиванием, так как данный метод моделирования остается устойчивым в том случае, когда используемый временной шаг не превышает предела, который напрямую свя-

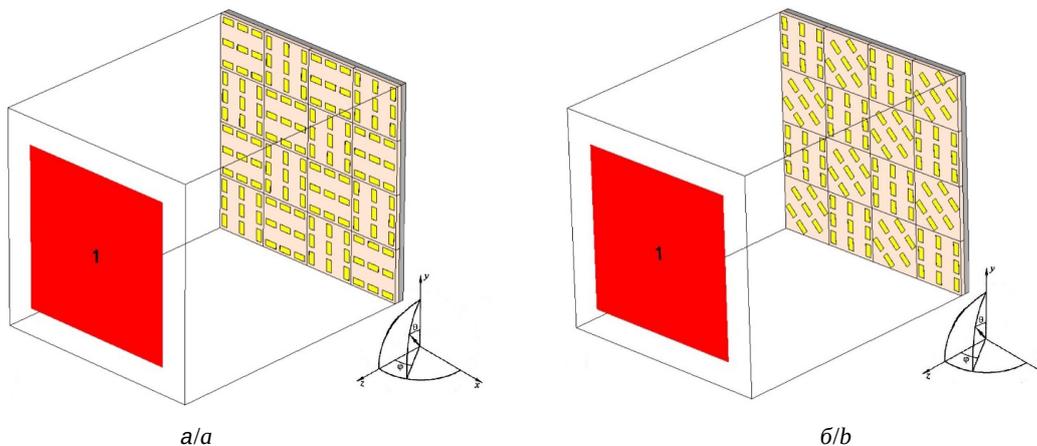


Рис. 1. Промоделированные структуры: а – МС-1; б – МС-2 (цвет онлайн)
Fig. 1. Modeled structures (MS): a – MS-1; b – MS-2 (color online)

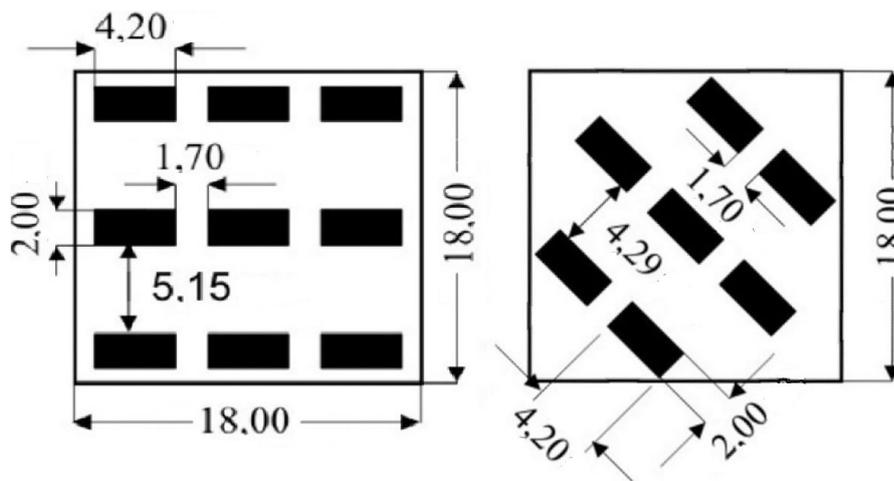


Рис. 2. Размеры структур, мм
Fig. 2. Structures' dimensions, mm

зан с минимальным шагом сетки, используемой для дискретизации пространства. Поэтому чем плотнее сеточное разбиение, тем меньше используемый временной шаг.

Моделирование процесса взаимодействия осуществлялось последовательно: сначала модель возбуждается широкополосным сигналом во временной области (гауссовский импульс), затем рассчитывается отклик структуры во временной области (выходной сигнал во временной области) и в конце для получения более точных результатов в заданном диапазоне частот выполняется дискретное преобразование Фурье для временных сигналов.

Для повышения эффективности и точности вычислителя были задействованы следующие методы аппроксимации модели: технология Perfect Boundary Approximation (PBA) [18], применимая в случае дискретизации любых криволинейных поверхностей, а также Thin Sheet Technique (TST) [19], используемая при моделировании тонких структур либо же напыленных или осажденных пленок. Указанные техники позволяют избежать высокой детализации сеточного разбиения и, следовательно, обеспечивают сокращение времени моделирования, а также более эффективное использование памяти.

Для моделирования были заданы следующие параметры. Частотный диапазон составлял от 16 до 25 ГГц. Показания снимались в разных точках: для первой структуры на 21.3, 22.5 и 24.4 ГГц; для второй – 17.3, 20.6 и 22.2 ГГц. Такой выбор частот объясняется тем, что в предыдущих наших работах на эту тему было выявлено, что различные МП обладают своей уникальной ча-

стотной характеристикой, зависящей напрямую от типа структуры и геометрических размеров резонаторов [20]. Поэтому для более тщательного наблюдения изменения их диаграмм в динамике, мы выбрали три характерные точки: максимум прохождения, минимум прохождения и усредненное значение, что соответствует вышеуказанным частотам.

В качестве источника излучения выбран в качестве волноводный порт, предназначенный для моделирования ввода и вывода энергии. Этот вид порта имитирует бесконечно длинный волновод, соединенный со структурой, являясь одновременно и источником волны, и приемником. Его размеры 54×54 мм, расстояние до структуры 90 мм (рис. 3). Нестандартные размеры порта были выбраны исходя из максимального соответствия нормировочных экспериментов: отражения на зеркале и прохождения свободного пространства.

Далее определялся тип волны. Падающая волна была задана плоской (рис. 4, снизу), имеющей линейную поляризацию (рис. 4, сверху) (вектор напряженности электрического поля E параллелен оси X (рис. 1), угол падения волны – 90° , т. е. параллельно оси Z (см. рис. 1).

После выставления основных параметров, задаем граничные условия для бокса, внутри которого находится порт, исследуемая структура и распространяется волна (рис. 5). В качестве граничных условий было выставлено открытое пространство (*open*) во всех проекциях, так как ранее была задана плоская падающая волна, и сам эксперимент проводился также в открытом пространстве.

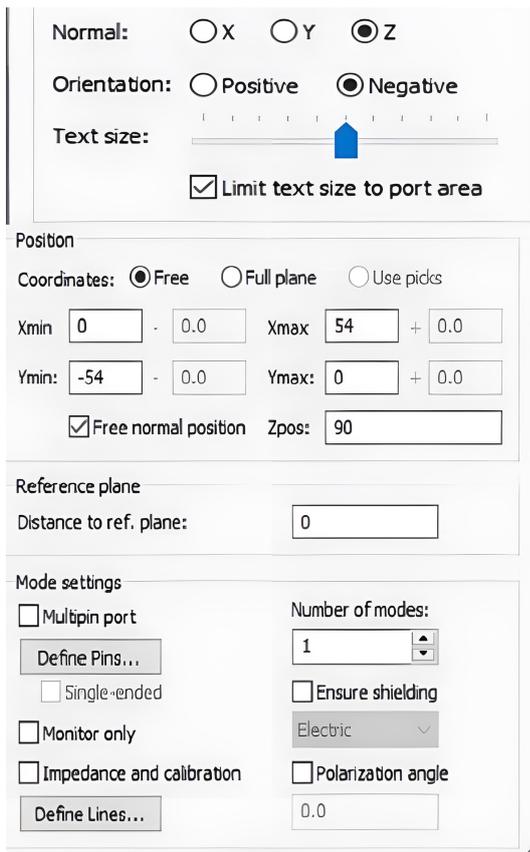
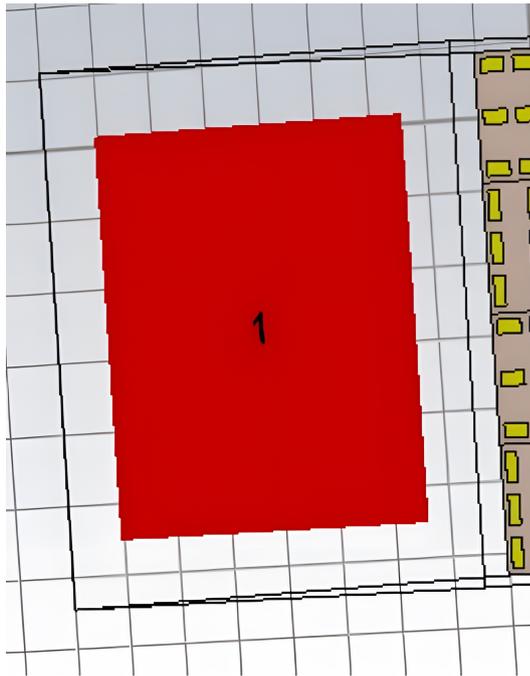


Рис. 3. Волноводный порт (слева) и его параметры (справа) (цвет онлайн)

Fig. 3. Waveguide port (on the left) and it's parameters (on the right) (color online)

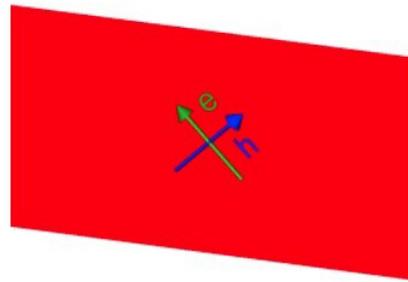
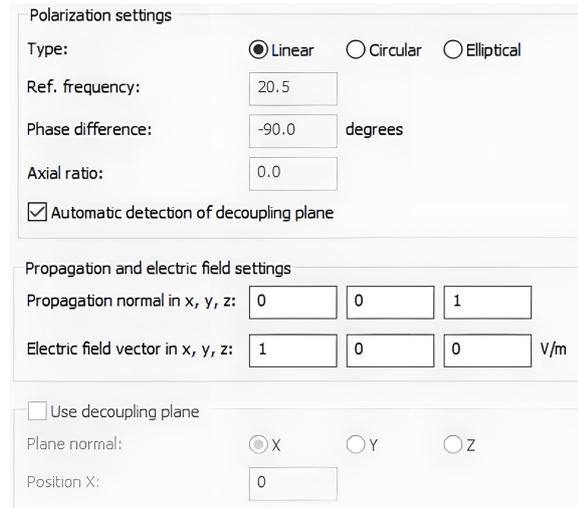


Рис. 4. Параметры падающей волны (сверху), плоская волна с вектором электрического и магнитного поля (снизу) (цвет онлайн)

Fig. 4. Parameters of the incident wave (on the top), the plane wave with electric and magnetic field vectors (on the bottom) (color online)

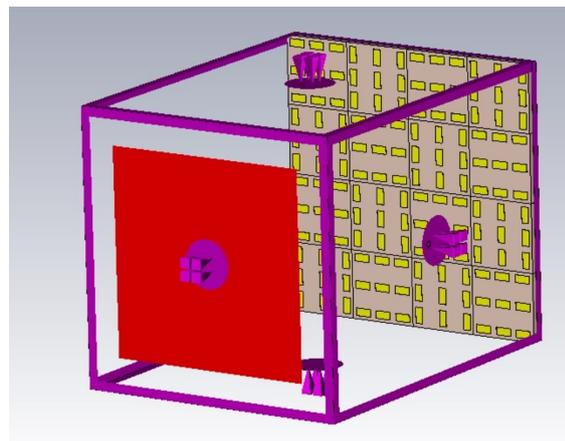


Рис. 5. Бокс с заданными граничными условиями (цвет онлайн)

Fig. 5. Box with specified boundary conditions (color online)

2. Полученные результаты

Для подтверждения модельного представления МП с шахматным чередованием задействованы экспериментальные зависимости,



полученные в ходе эксперимента с реальными структурами в таких же условиях. Первоначально вся экспериментальная установка нормировалась на прохождение свободного пространства и отражение от ВЧ-зеркала. Обе метаструктуры в сравнении с нормальным отражением от зеркала показали ослабление центрального лепестка не менее 50% (см. врезки на рис. 6, а, б). Для первой модели МС-1 получены результаты, представленные на рис. 6, а.

Из полученных диаграмм видно, что величина нормальной составляющей отраженной элек-

тромагнитной волны падает при приближении частоты падающего излучения к резонансной. Для данной структуры резонансной частотой является 22.5 ГГц [20]. При увеличении частоты степень ослабления падает, тем самым увеличивая отраженную от структуры волну. Также можно увидеть, что диаграмма рассеяния для этой структуры имеет явные боковые лепестки, ширина которых варьируется в зависимости от частоты. В частности, для резонансной частоты ширина бокового лепестка составляет 24°. Теперь сравним данные с реальным экспериментом

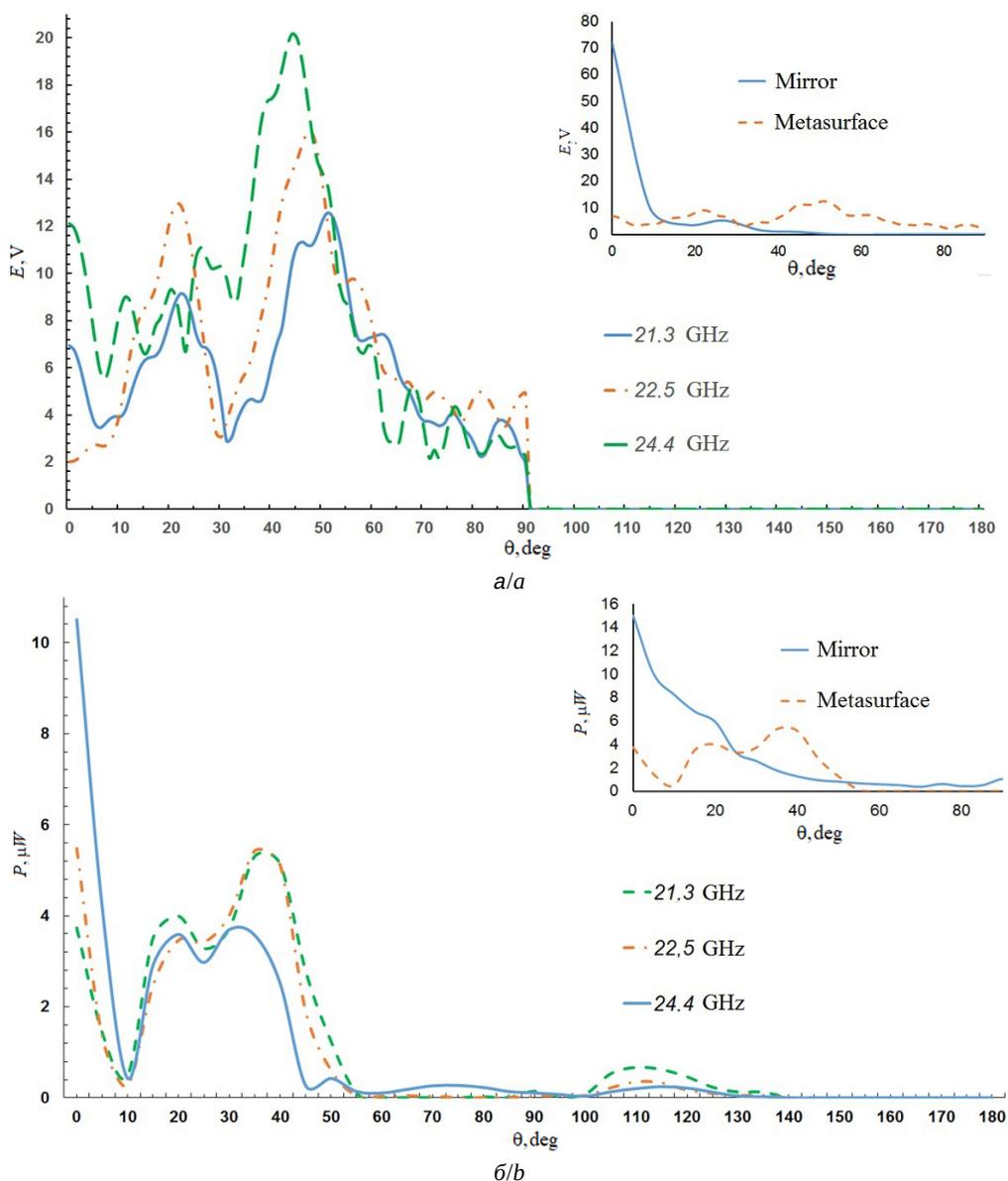


Рис. 6. Диаграмма рассеяния МС-1: а – моделирование, б – эксперимент. На врезке: сравнение с зеркалом на частоте 21.3 ГГц (цвет онлайн)

Fig. 6. Scattering diagram for MS-1: а – simulation, б – experiment. Inset: comparison with a mirror at the frequency of 21.3 GHz (color online)



(рис. 6, б). Для получения экспериментальных кривых был использован метод бистатического измерения зависимости уровня отраженного излучения от угла приемной антенны.

Можно видеть, что модель имеет те же характерные особенности, что и реальные образцы, а именно боковые лепестки с формой, схожей с теми, что были получены при моделировании, и характер спада кривой. Начальная высокая мощность, а также наличие излучения в области

от 90° до 140° в экспериментальной модели объясняются физическими особенностями приемной антенны, а также наличием дифракционных явлений, что приводит к накоплению различного рода погрешностей.

Рассмотрим теперь полученные диаграммы рассеяния для МС-2 (рис. 7, а).

Как видно из полученных результатов, нормальная составляющая отраженной волны также падает при приближении к резонансной частоте

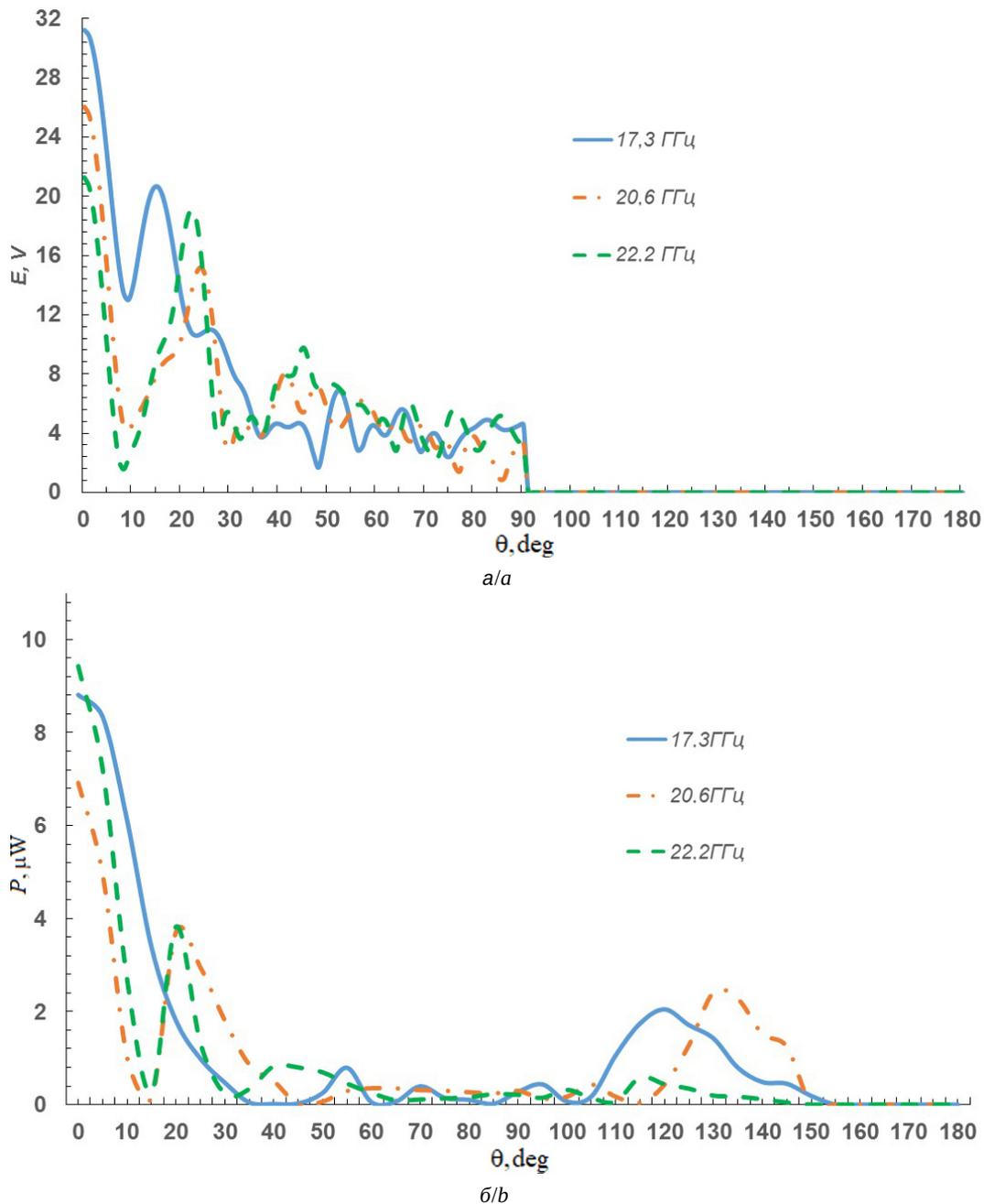


Рис. 7. Диаграмма рассеяния МС-2: а – моделирование, б – эксперимент (цвет онлайн)

Fig. 7. Scattering diagram for MS-2: a – simulation, b – experiment (color online)



те, что говорит нам о наилучших показателях ослабления на данной частоте. Величина общего ослабления уступает образцу МС-1, также амплитуда и ширина боковых лепестков для данной структуры меньше относительно МС-1.

В практическом эксперименте на МС-2 были получены следующие данные (рис. 7, б). Видны схожие с моделью зависимости. Структура также обладает боковыми лепестками, а величина отраженной в направлении нормали мощности изменяется в зависимости от частоты падающего излучения. Стоит отметить, что величина основного лепестка на резонансной частоте в 0° обладает наибольшей мощностью, что не следует общей тенденции, описанной ранее. Это может объясняться частотной зависимостью излучающей и приемной антенны, а также дифракционными эффектами в открытом пространстве, связанными с конечными размерами структуры и несовершенством экспериментальной установки. При сравнении модели с экспериментальными диаграммами становится ясно, что наибольшим ослаблением рассмотренная структура обладает на той же резонансной частоте и согласуется с полученными моделью данными.

Заключение

В ходе работы было произведено моделирование структур с шахматным чередованием в двух конфигурациях в пакете CST Studio и сравнение их с экспериментально полученными зависимостями.

Обе структуры продемонстрировали рассеяние падающей волны, что наглядно демонстрирует перераспределение центрального лепестка на диаграммах рассеяния. Сравнение показало, что промоделированные металлоповерхности имеют схожие тенденции с экспериментальными диаграммами. Особенно это видно по характерным пикам и характеру спада кривых (расхождение положения пиков и наклона кривых не более $5\text{--}10^\circ$). Отличия же объясняются физическими особенностями проведения эксперимента – погрешностями, возникающими вследствие вторичного переизлучения от приемной антенны, большим шагом изменения угла приемной антенны при снятии мощности, а также наличием дифракционных явлений в открытом пространстве на самих образцах, что также приводит к накоплению различного рода погрешностей. Можно отметить, что при моделировании представленных метаповерхностей пакет CST Studio

показал результаты, близкие к полученным в ходе эксперимента с реальными образцами, и будет использоваться нами в дальнейших исследованиях в этой области.

В дальнейшем планируются дополнительные исследования, направленные на модификацию рассмотренных структур в целях улучшения их характеристик. В перспективе они могут найти применение во многих системах и технологиях, таких как стелс-технологии, экранирование электронных устройств и т. д.

Список литературы

1. Chen H.-T., Padilla W. J., Zide J. M. O., Gossard A. C., Taylor A. J., Averitt R. D. Active terahertz metamaterial devices // *Nature*. 2006. Vol. 444, № 7119. P. 597–600. <https://doi.org/10.1038/nature05343>
2. Della Giovampaola C., Engheta N. Digital metamaterials // *Nature Materials*. 2014. Vol. 13, № 12. P. 1115–1121. <https://doi.org/10.1038/nmat4082>
3. Zaki B., Firouzeh Z.-H., Zeidaabadi-Nezhad A., Maddahali M. Wideband RCS reduction using three different implementations of AMC structures // *IET Microwaves, Antennas & Propagation*. 2019. Vol. 13, № 5. P. 533–540. <https://doi.org/10.1049/iet-map.2018.5024>
4. Yan X., Liang L., Yang J., Liu W., Ding X., Xu D., Zhang Y., Cui T., Yao J. Broadband, wide-angle, low-scattering terahertz wave by a flexible 2-bit coding metasurface // *Optics Express*. 2015. Vol. 23, № 22. P. 29128–29137. <https://doi.org/10.1364/OE.23.029128>
5. Khan T. A., Li J., Chen J., Raza M. U., Zhang A. Design of a Low Scattering Metasurface for Stealth Applications // *Materials*. 2019. Vol. 12, № 18. Article number 3031. <https://doi.org/10.3390/ma12183031>
6. Shao L., Premaratne M., Zhu W. Dual-Functional Coding Metasurfaces Made of Anisotropic All-Dielectric Resonators // *IEEE Access*. 2019. Vol. 7. P. 45716–45722. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2908830>
7. Zhao Y., Cao X., Gao J., Liu X., Li S. Jigsaw puzzle metasurface for multiple functions: polarization conversion, anomalous reflection and diffusion // *Optics Express*. 2016. Vol. 24, № 10. P. 11208–11217. <https://doi.org/10.1364/OE.24.011208>
8. Zhuang Y., Wang G., Zhang Q., Zhou C. Low-Scattering Tri-Band Metasurface Using Combination of Diffusion, Absorption and Cancellation // *IEEE Access*. 2018. Vol. 6. P. 17306–17312. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2810262>
9. Cui T. J., Qi M. Q., Wan X., Zhao J., Cheng Q. Coding metamaterials, digital metamaterials and programmable metamaterials // *Light: Science & Applications*. 2014. Vol. 3, № 10. P. e218. <https://doi.org/10.1038/lsa.2014.99>
10. Семенихин А. И., Семенихина Д. В., Юханов Ю. В., Благовисный П. В. блочный принцип построения и оценки снижения эпр непоглощающих широкополосных 2-битных анизотропных цифровых метапо-



- крытый // Журнал радиоэлектроники. 2020, № 12. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2020.12.4>
11. Курушин А. А., Пластикова А. Н. Проектирование СВЧ устройств в среде CST Microwave Studio. М. : Издательство МЭИ, 2011. 155 с.
 12. Благовисный П. В., Семенихин А. И. Полноволновые и импедансные модели сверхширокополосных тонких твистметаполяризаторов для радиомаскирующих покрытий // Журнал радиоэлектроники. 2020. № 8. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2020.8.12>
 13. Банков С. Е., Курушин А. А. Электродинамика для пользователей САПР СВЧ. М. : Солон-Пресс, 2017. 316 с.
 14. Курушин А. А. Школа проектирования СВЧ устройств в CST STUDIO SUITE. М. : One-Book, 2014. 433 с.
 15. Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1966. Vol. 14, № 3. P. 302–307. <https://doi.org/10.1109/TAP.1966.1138693>
 16. Krietenstein B., Schuhmann R., Weiland T., Thoma P. The Perfect Boundary Approximation Technique Facing the Big Challenge of High Precision Field Computation // Proceedings of the XIX International Linear Accelerator Conference (LINAC 98). Chicago, 1998. P. 860–862.
 17. Weiland T. A discretization model for the solution of Maxwell's equations for six-component fields // Archiv Elektronik und Uebertragungstechnik. 1977. Bd. 31. S. 116–120.
 18. Горбачев А. П., Ермаков Е. А. Проектирование печатных фазированных антенных решеток в САПР «CST Microwave Studio». Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2008. 88 с.
 19. Demming-Janssen F., Krüger H., Thoma P., Löcker C., Bertuch T., Eibert T. Time domain simulation of conformal antennas using the finite integration technique (FIT) with PBA geometry discretisation and local time step adaptive sub-gridding // 3rd European Workshop on Conformal Antennas. Bonn, 2003. P. 45–48.
 20. Мазинов А. С., Фитаев И. Ш., Болдырев Н. А. Влияние пространственной ориентации проводящих элементов составной метаповерхности на их частотные характеристики и диаграммы рассеивания в свч-диапазоне // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2022. Т. 18, № 4. С. 86–90.
 4. Yan X., Liang L., Yang J., Liu W., Ding X., Xu D., Zhang Y., Cui T., Yao J. Broadband, wide-angle, low-scattering terahertz wave by a flexible 2-bit coding metasurface. *Optics Express*, 2015, vol. 23, no. 22, pp. 29128–29137. <https://doi.org/10.1364/OE.23.029128>
 5. Khan T. A., Li J., Chen J., Raza M. U., Zhang A. Design of a Low Scattering Metasurface for Stealth Applications. *Materials*, 2019, vol. 12, no. 18, article no. 3031. <https://doi.org/10.3390/ma12183031>
 6. Shao L., Premaratne M., Zhu W. Dual-Functional Coding Metasurfaces Made of Anisotropic All-Dielectric Resonators. *IEEE Access*, 2019, vol. 7, pp. 45716–45722. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2908830>
 7. Zhao Y., Cao X., Gao J., Liu X., Li S. Jigsaw puzzle metasurface for multiple functions: Polarization conversion, anomalous reflection and diffusion. *Optics Express*, 2016, vol. 24, no. 10, pp. 11208–11217. <https://doi.org/10.1364/OE.24.011208>
 8. Zhuang Y., Wang G., Zhang Q., Zhou C. Low-Scattering Tri-Band Metasurface Using Combination of Diffusion, Absorption and Cancellation. *IEEE Access*, 2018, vol. 6, pp. 17306–17312. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2810262>
 9. Cui T. J., Qi M. Q., Wan X., Zhao J., Cheng Q. Coding metamaterials, digital metamaterials and programmable metamaterials. *Light: Science & Applications*, 2014, vol. 3, no. 10, pp. e218. <https://doi.org/10.1038/lsa.2014.99>
 10. Semenikhin A. I., Semenikhina D. V., Yukhanov Y. V., Blagovisnyy P. V. Block principle of constructing and estimating the rcs reduction of nonabsorbing broadband 2 bit anisotropic digital meta-coatings. *Zhurnal Radioelektroniki* [Journal of Radio Electronics], 2020, no. 12 (in Russian). <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2020.12.4>
 11. Kurushin A. A., Plastikova A. N. *Proektirovanie SVCh ustroystv v srede CST Microwave Studio* [Designing microwave devices in CST Microwave Studio suite]. Moscow, Moscow Power Engineering Institute Publ., 2011. 155 p. (in Russian).
 12. Blagovisnyy P. V., Semenikhin A. I. Full-wave and impedance models of ultra wideband thin twist-metapolarizers for cloaking coverings. *Zhurnal Radioelektroniki* [Journal of Radio Electronics], 2020, no. 8 (in Russian). <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2020.8.12>
 13. Bankov S. E., Kurushin A. A. *Elektrodinamika dlia pol'zovatelei SAPR SVCh* [Electrodynamics for microwave CAD users]. Moscow, Solon-Press, 2017. 316 p. (in Russian).
 14. Kurushin A. A. *Shkola proektirovaniia SVCh ustroystv v CST STUDIO SUITE* [School of designing microwave devices in CST Studio suite]. Moscow, One-Book, 2014. 433 p. (in Russian).
 15. Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1966, vol. 14, no. 3, pp. 302–307. <https://doi.org/10.1109/TAP.1966.1138693>
 16. Krietenstein B., Schuhmann R., Weiland T., Thoma P. The Perfect Boundary Approximation Technique Facing

References

1. Chen H.-T., Padilla W. J., Zide J. M. O., Gossard A. C., Taylor A. J., Averitt R. D. Active terahertz metamaterial devices. *Nature*, 2006, vol. 444, no. 7119, pp. 597–600. <https://doi.org/10.1038/nature05343>
2. Della Giovampaola C., Engheta N. Digital metamaterials. *Nature Materials*, 2014, vol. 13, no. 12, pp. 1115–1121. <https://doi.org/10.1038/nmat4082>
3. Zaki B., Firouzeh Z.-H., Zeidaabadi-Nezhad A., Maddahali M. Wideband RCS reduction using three different implementations of AMC structures. *IET Microwaves, Antennas & Propagation*, 2019, vol. 13, no. 5, pp. 533–540. <https://doi.org/10.1049/iet-map.2018.5024>



- the Big Challenge of High Precision Field Computation. *Proceedings of the XIX International Linear Accelerator Conference (LINAC 98)*. Chicago, 1998, pp. 860–862.
17. Weiland T. A discretization model for the solution of Maxwell's equations for six-component fields. *Archiv Elektronik und Uebertragungstechnik*, 1977, Bd. 31, S. 116–120.
18. Gorbachev A. P., Ermakov E. A. *Proektirovanie pechatnykh fazirovannykh antenykh reshetok v SAPR "CST Microwave Studio"* [Designing printed phased array antennas in "CST Microwave Studio" CAD]. Novosibirsk, Novosibirsk State Technical University Publ., 2008. 88 p. (in Russian).
19. Demming-Janssen F., Krüger H., Thoma P., Löcker C., Bertuch T., Eibert T. Time domain simulation of conformal antennas using the finite integration technique (FIT) with PBA geometry discretisation and local time step adaptive sub-gridding. *3rd European Workshop on Conformal Antennas*. Bonn, 2003, pp. 45–48.
20. Mazinov A. S., Fitaev I. Sh., Boldyrev N. A. Influence of spatial orientation of conducting elements of composite metasurfaces on their frequency characteristics and scattering diagrams in the microwave range. *Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2022, vol. 18, no. 4, pp. 86–90 (in Russian).

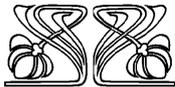
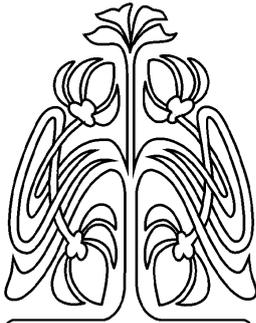
Поступила в редакцию 10.01.2023; одобрена после рецензирования 13.02.2023; принята к публикации 25.02.2023
The article was submitted 10.01.2023; approved after reviewing 13.02.2023; accepted for publication 25.02.2023



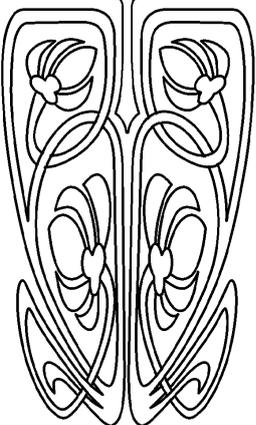
ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 112–119
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 112–119
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-112-119>, EDN: RGNNHF

Научная статья
УДК 535.2:621.391



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ



Фазочувствительное усиление оптического сигнала в боковых полосах модуляционной неустойчивости при одночастотной накачке

А. И. Конюхов¹✉, Л. А. Мельников²

¹Саратовский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

²Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А., Россия, 410054, г. Саратов, ул. Политехническая, д. 77

Конюхов Андрей Иванович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей, теоретической и компьютерной физики, KonukhovAI@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6502-7405>, Author ID: 42239

Мельников Леонид Аркадьевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Приборостроение», lam.pels@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0423-3982>, Author ID: 20924

Аннотация. Модуляционная неустойчивость является распространенным явлением в физике нелинейных волн. Данный эффект проявляется в виде экспоненциального роста малых гармонических возмущений вокруг несущей частоты волнового пакета. Для возникновения модуляционной неустойчивости необходимо наличие кубической нелинейности и аномальной дисперсии групповой скорости. В оптических волокнах с периодическим изменением дисперсии модуляционная неустойчивость может возникать как в режиме аномальной, так и нормальной дисперсии. В статье рассмотрен процесс модуляционной неустойчивости при взаимодействии сигнальной волны, холостой волны и мощной волны накачки. Модуляция дисперсии приводит к возникновению резонансных полос усиления. Их положение определяется периодом модуляции дисперсии. На основе численного решения укороченных волновых уравнений авторами статьи показано, что фазочувствительное усиление может наблюдаться в боковых полосах модуляционной неустойчивости. Параметрический коэффициент усиления зависит как от фаз взаимодействующих волн, так и от фазы модуляции дисперсии. В зависимости от соотношения между фазами реализуется либо режим усиления, либо режим ослабления сигнальной волны. Такой эффект позволяет управлять положением частотных полос ослабления сигнала в пределах одной полосы модуляционной неустойчивости. Показано, что использование оптических волокон со сложным профилем модуляции дисперсии позволяет формировать широкую полосу усиления. В качестве примера рассмотрено волокно с модуляцией диаметра, определяемой суперпозицией трех синусоид с различной амплитудой, фазой и периодом модуляции. Показано, что в пределах одной полосы усиления возможно возникновение нескольких узких полос ослабления сигнала. Положение полос ослабления сигнала определяется фазами взаимодействующих волн.

Ключевые слова: фазочувствительное усиление, оптическое волокно с модуляцией дисперсии, параметрический усилитель

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00396, <https://rscf.ru/project/22-12-00396/>). Авторы благодарны Ю. Г. Конюховой за помощь в подготовке публикации.



Для цитирования: Конюхов А. И., Мельников Л. А. Фазочувствительное усиление оптического сигнала в боковых полосах модуляционной неустойчивости при одночастотной накачке // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 112–119. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-112-119>, EDN: RGNHNF

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Phase-sensitive amplification of an optical signal in the modulation instability sidebands with single-frequency pump

A. I. Konyukhov¹✉, L. A. Melnikov²

¹Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

²Yuri Gagarin State Technical University of Saratov, 77 Politechnicheskaya St., Saratov 410054, Russia

Andrey I. Konyukhov, KonukhovAI@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6502-7405>, Author ID: 42239

Leonid A. Melnikov, lam.pels@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0423-3982>, Author ID: 20924

Abstract. Background and Objectives: The use of optical amplifiers in optical communications systems is currently of great interest. An optical signal can be amplified using semiconductor amplifiers, erbium or Raman amplifiers. Unfortunately, a linear laser amplifier adds spontaneous emission noise to the signal, degrading the signal-to-noise ratio. The use of phase-sensitive parametric amplifiers allows increasing the signal-to-noise ratio. Phase-sensitive amplifiers provide phase and amplitude squeezing that gives additional opportunities for signal regeneration and coding. Phase-sensitive amplification can be realized using four-wave mixing in highly nonlinear fibers. The resonant frequency for the parametric gain depends on the phase matching conditions for interacting waves. In real fibers, the resonant frequency is randomly shifted by fluctuations of the fiber dispersion. Dispersion fluctuation leads to the degradation of the gain and narrowing of the gain bandwidth. Resonant frequencies for the parametric gain can be extended using diameter modulation along the fiber length. Modulation of the fiber diameter gives rise to the modulation of the fiber dispersion. Periodic variation of the fiber dispersion leads to the excitation of the multipeak modulation instability spectrum. The signal wave can be amplified in modulation instability sidebands. Previous studies of the parametric gain in dispersion oscillating fibers are focused on the phase-insensitive amplification. In the present work, the phase-sensitive amplification in modulation instability sidebands is considered. **Materials and Methods:** We consider a truncated three-wave model for the parametric amplification of a continuous signal in the presence of strong single-frequency pump wave and weak idler wave. The dispersion and nonlinearity coefficients are calculated for the highly-nonlinear optical fiber with the W-shaped refractive index cross-section. Using numerical simulation, the gain coefficient for the signal wave was calculated in the terahertz frequency detuning range. Both the sine-wave modulation and the multi-frequency modulation of the fiber dispersion are considered. **Results:** We have found that the phase-sensitive amplification can be realized in high-order modulation instability sidebands. Single-frequency pump is sufficient to excite quasi-phase-matching sidebands. The amplification or depletion of the signal wave depends both on the individual phases of the interacting waves and on the phase of the dispersion oscillation. This effect makes it possible to manipulate the position of the depletion bands within the modulation instability sidebands. Resonant frequencies of the modulation instability sidebands depend on the modulation period. But the gain bandwidth depends on the type of modulation. Multifrequency modulation allows extending the gain bandwidth. We have found that high-order modulation instability sidebands can contain several narrow depletion bands, which frequency depends on the phases of the interacting waves and the phase of the dispersion oscillation. **Conclusion:** Modification of the phase-matching conditions in optical fibers with a variable dispersion allows improving the performance of parametric amplifiers. We have proposed the use of dispersion oscillating fiber for the generation of a comb of multiple spectral sidebands with phase-sensitive gain. When compared with the other possible schemes such as phase matching induced by the fourth-order dispersion coefficient, we expect that our proposed technique is more tolerant with respect to the longitudinal stochastic fluctuations of the fiber properties.

Keywords: phase-sensitive amplification, dispersion oscillating optical fiber, parametric amplifier

Acknowledgements: The study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-12-00396, <https://rscf.ru/project/22-12-00396/>). The authors are grateful to Julia G. Konyukhova for the help in the preparation of the article.

For citation: Konyukhov A. I., Melnikov L. A. Phase-sensitive amplification of an optical signal in the modulation instability sidebands with single-frequency pump. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 112–119 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-112-119>, EDN: RGNHNF

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC0-BY 4.0)

Введение

Оптоволоконные параметрические усилители обладают высоким коэффициентом усиления, низким уровнем шума и могут работать в фазочувствительном режиме [1–3]. Использование фазочувствительных усилителей (ФЧУ) в квантовых системах передачи информации позволяет повысить эффективность детектирования отдель-

ных фотонов [4], поскольку собственные шумы у такого усилителя отсутствуют. Одним из важных применений ФЧУ является регенерация фазомодулированных сигналов в телекоммуникационных системах [5].

Недостатком оптоволоконных усилителей является сложность согласования фаз взаимодействующих волн [6]. Условия фазового синхро-



низма зависят от флуктуаций диаметра волокна [7]. Из-за флуктуаций диаметра волокна дисперсия групповой скорости (ДГС) и эффективная нелинейность изменяются по длине волокна. Флуктуация дисперсии ограничивает полосу усиления. Преодолеть это ограничение возможно с использованием периодической модуляции диаметра волокна. На резонансных частотах, определяемых условиями четырехволнового квазисинхронизма, возникают полосы модуляционной неустойчивости (МН) [8]. Возбуждение боковых полос МН при усилении спонтанного шума продемонстрировано в [9]. Усиление сигнальной волны в поле мощной волны накачки продемонстрировано в работе [10]. Параметрическое усиление поля сигнала в боковой полосе МН не ограничивается обычным случаем параметрического усиления в волокне с аномальной дисперсией. Возможно также усиление сигнальной волны накачкой, находящейся в режиме нормальной дисперсии [11].

Процесс МН является примером вырожденного четырехволнового смещения (ЧВС). Во взаимодействии участвуют как минимум три световые волны: волна накачки, сигнальная и холостая волны [1,5]. При наличии на входе в волокно только двух волн (волны накачки и сигнальной волны) реализуется режим фазонезависимого усиления (ФНУ), поскольку холостая волна, возникающая в процессе распространения излучения, является комплексно сопряженной к сигнальной [7]. Предыдущие исследования МН в волокнах с периодическим изменением дисперсии [8–12] относятся к ФНУ.

Для реализации ФЧУ необходимо обеспечить на входе в волокно наличие сигнальной и холостой волн, а также мощной волны накачки. В этом случае коэффициент усиления будет зависеть от начальной фазы взаимодействующих волн. Существуют другие схемы реализации ФЧУ, например с двухчастотной накачкой либо с использованием различной поляризации волн [5]. Однако эти схемы сложны в экспериментальной реализации.

В данной работе рассмотрены ФЧУ в боковых полосах МН. Для моделирования использовались укороченные волновые уравнения [13]. Рассмотрены ФЧУ в волокнах двух типов: i) с синусоидальной модуляцией, ii) с модуляцией, определяемой суперпозицией трех синусоид с различными периодом, амплитудой и фазой.

1. Параметрическое усиление в волокне с периодическим изменением дисперсии

Вырожденное параметрическое усиление в среде $\chi_{(3)}$ связано с взаимодействием трех стационарных монохроматических волн на частотах ω_0 , $\omega_1 = \omega_0 - \Omega$ и $\omega_2 = \omega_0 + \Omega$ [7]. Все волны имеют коллинеарную поляризацию и распространяются в прямом направлении. Полное поперечное электрическое поле $E(x, y, z)$, распространяющееся в волокне переменного диаметра, можно записать следующим образом:

$$E(x, y, z) = U(x, y, z) \sum_{m=0}^2 A_m \exp(i\zeta_m(z) - i\omega_m t), \quad (1)$$

где $m = 0, 1, 2$; A_0 – медленно меняющаяся амплитуда волны накачки; A_1 и A_2 – амплитуды холостой и сигнальной волн. Частоты волн равны ω_0 , ω_1 и ω_2 соответственно. Фазовый набег определяется интегралом $\zeta_m(z) = \int_0^z \beta(z', \omega)$, где z – длина распространения. Постоянная распространения $\beta(z, \omega)$ и поперечный профиль моды волокна $U(x, y, z)$ определяются для заданного профиля показателя преломления $n(r)$. Предполагаем, что профиль волокна изменяется медленно ($|\partial\beta(z, \omega)/\partial z| \ll 1$). В этом случае вырожденное скалярное ЧВС можно описать системой трех связанных уравнений [7, 13]:

$$\frac{dA_0}{dz} = i\gamma(z)(|A_0|^2 + 2|A_1|^2 + 2|A_2|^2)A_0 + 2i\gamma(z)A_0^*A_1A_2 \exp(i\Delta\zeta(z)) - \frac{\alpha}{2}A_0, \quad (2)$$

$$\frac{dA_1}{dz} = i\gamma(z)(2|A_0|^2 + 2|A_1|^2 + 2|A_2|^2)A_1 + 2i\gamma(z)A_0^2A_2^* \exp(i\Delta\zeta(z)) - \frac{\alpha}{2}A_1, \quad (3)$$

$$\frac{dA_2}{dz} = i\gamma(z)(2|A_0|^2 + 2|A_1|^2 + |A_2|^2)A_2 + 2i\gamma(z)A_0^2A_1^* \exp(i\Delta\zeta(z)) - \frac{\alpha}{2}A_2, \quad (4)$$

где $\Delta\zeta(z) = \int_0^z \{\beta(\omega_1, z') + \beta(\omega_2, z') - 2\beta(\omega_0, z')\} dz' -$ фазовая расстройка, α – коэффициент потерь.

Разложим постоянную распространения в ряд Тейлора вблизи центральной частоты ω_0 :

$$\begin{aligned} \beta(\omega_0 \pm \Omega) &= \\ &= \beta(\omega_0) \pm \beta_1\Omega + \beta_2\Omega^2/2 \pm \beta_3\Omega^3/6 + \beta_4\Omega^4/24, \end{aligned} \quad (5)$$

где производные $\beta_j = \partial^j\beta/\partial\omega^j$, $j = 1, 2, 3, 4$, вычисляются для центральной частоты ω_0 . Используя (5) и $\omega_1 = \omega_0 + \Omega$, $\omega_2 = \omega_0 - \Omega$, линейное рассогласование волновых чисел можно выразить следующим образом:

$$\Delta\zeta(z) = \Omega^2 \int_0^z \beta_2(z') dz' + \Omega^4 12^{-1} \int_0^z \beta_4(z') dz'. \quad (6)$$



Усиление сигнальной волны рассчитывалось по формуле

$$G_S = 10 \lg (|A_2(L)|^2 |A_2(0)|^{-2}), \quad (7)$$

где L – длина волокна, \lg – десятичный логарифм.

В расчетах мы предполагаем, что начальная мощность волны накачки $P_0 = |A_0(0)|^2 = 0.5$ Вт. Начальные мощности сигнальной и холостой волн равны $|A_1(0)|^2 = |A_2(0)|^2 = 10^{-6}$ Вт. Холостая волна является комплексно сопряженной к сигнальной, поэтому использовалось начальное условие $\varphi_1(0) = -\varphi_2(0)$. Такое равенство возникает при генерации начальных полей методом копирования [1–3]. Коэффициент потерь $\alpha = 0.092$ км⁻¹, что соответствует 0.4 дБ/км.

Отметим, что для непрерывного излучения система укороченных волновых уравнений (2)–(4) достаточно точно описывает процесс параметрического усиления. Для ФНУ результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментами [9, 11]. Поэтому для анализа ФЧУ мы также использовали укороченные волновые уравнения.

2. Синусоидальная модуляция

Модуляция диаметра волокна приводит к модуляции нелинейности и дисперсии групповой скорости [14, 15]. Изменение диаметра волокна не должно приводить к нарушению одномодового режима распространения волн. В расчетах мы использовали параметры волокна [12], у которого амплитуда модуляции диаметра составляет величину, равную 10% от его среднего значения. Волокно остаётся одномодовым на частотах сигнальной волны, холостой волны и волны накачки.

Модуляция диаметра волокна должна приводить к увеличению потерь. Для точной оценки этих потерь необходимо решить задачу о распространении излучения в волокне с переменным диаметром. Такой анализ выходит за рамки данной работы, и мы ограничились использованием данных из литературы. Для высоконелинейных волокон с W-профилем показателя преломления и периодом модуляции от десятков до сотен метров потери не превышают величину 0.7 дБ/км [9–12, 14, 15].

При синусоидальной модуляции диаметра волокна для коэффициентов дисперсии и нелинейности можно использовать аппроксимацию синусом. Для волокна с W-профилем показателя

преломления [12]

$$\langle \beta_2 \rangle (z) = \beta_2 [11.38 \sin (2\pi z / z_m + \varphi_m)], \quad (8)$$

$$\langle \beta_4 \rangle (z) = \beta_4 [1 + 225 \sin (2\pi z / z_m + \varphi_m)], \quad (9)$$

$$\gamma(z) = \gamma [10.017 \sin (2\pi z / z_m + \varphi_m)], \quad (10)$$

где z_m – период модуляции, φ_m – фаза модуляции, среднее значение ДГС $\langle \beta_2 \rangle = 2.16$ пс²·км⁻¹, среднее значение коэффициента дисперсии четвертого порядка $\langle \beta_4 \rangle = 3.77 \times 10^{-4}$ пс⁴·км⁻¹, среднее значение эффективного коэффициента нелинейности волокна $\langle \gamma \rangle = 9.44$ Вт·км⁻¹. Величины (9)–(10) были рассчитаны для центральной длины волны 1550 нм.

Резонансная частота ν_q задается условием фазового квазисинхронизма [11]

$$\nu_q = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{2}{\langle \beta_2 \rangle} q \frac{\pi}{z_m} + \langle \gamma \rangle 2P_0 \right]^{1/2}. \quad (11)$$

Фундаментальный спектр усиления МН образуется при $q = 0$. Если мы рассматриваем распространение сигнальной и холостой волн в присутствии интенсивной волны накачки, то условия синхронизма требуют наличия аномальной дисперсии [13] ($\langle \beta_2 \rangle < 0$). Однако величина q может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Соответственно, нелинейный синхронизм может реализовываться как при нормальной дисперсии ($\langle \beta_2 \rangle > 0$), так и при аномальной дисперсии ($\langle \beta_2 \rangle < 0$).

Мы рассчитали коэффициент усиления сигнальной волны (7) вблизи двух резонансных частот, определяемых для $q = 1$ и $q = 2$ (рис. 1). Вблизи нуля дисперсии ($\langle \beta_2 \rangle \sim 0$) формула (11) является приближенной, поскольку она не учитывает насыщение усиления и дисперсию четвертого порядка. Резонансные частоты, рассчитанные при помощи формулы (11), равны $\nu_1 = 1.44$ ТГц и $\nu_2 = 1.98$ ТГц. Тогда как численное решение уравнений (2)–(4) показывает пиковое усиление на частотах 1.32 ТГц и 1.9 ТГц соответственно (см. рис. 1, $\varphi_P = -0.6$) Для ФНУ известен аналогичный эффект. Смещение резонансных частот было обнаружено в экспериментах [12].

При $\varphi_P = -0.6$ рад формируются широкие полосы усиления сигнальной волны. Изменение фазы волны накачки вызывает появление узкого провала ($G_S < 0$, см. рис. 1), связанного с ослаблением сигнальной волны. При изменении фазы от $\varphi_P = -0.6$ рад до $\varphi_P = 1.2$ рад провал

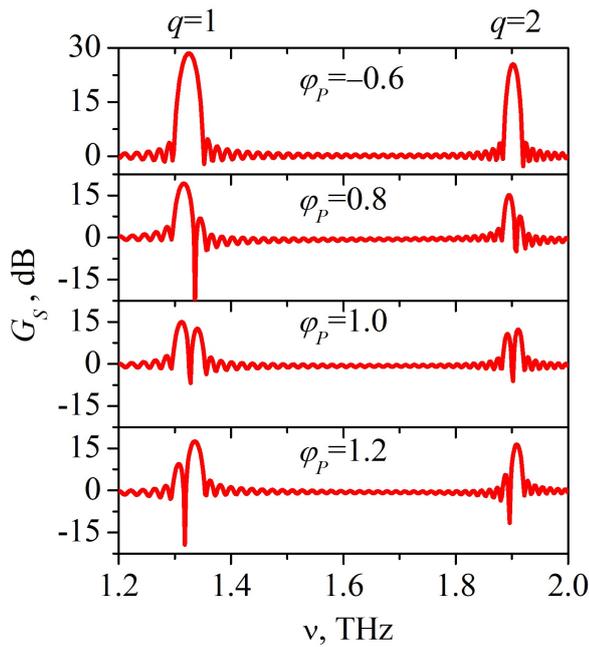


Рис. 1. Коэффициент усиления сигнальной волны для различных значений начальной фазы волны накачки $\varphi_p = \arg(A_0(0))$, фаза указана в радианах. Частотная отстройка $\nu = \Omega(2\pi)^{-1}$. Длина волокна $L = 1.4$ км, фаза модуляции $\varphi_m = 0$, период модуляции $z_m = 0.04$ км

Fig. 1. Signal wave gain for different values of the initial phase of the pump wave $\varphi_p = \arg(A_0(0))$, the phase is in radians. Frequency detuning is $\nu = \Omega(2\pi)^{-1}$. Fiber length is $L = 1.4$ km, modulation phase is $\varphi_m = 0$, modulation period is $z_m = 0.04$ km

в усилении перемещается из высокочастотной области в низкочастотную. Перемещение провала происходит синхронно как для первой полосы ($q = 1$), так и для второй ($q = 2$). Однако частота, соответствующая ослаблению сигнала, определяется не только фазой волны накачки, но и фазой модуляции дисперсии. Так, например, при $\varphi_m = -1.2$ рад и $\varphi_p = 0.05$ рад первая полоса ($q = 1$) не содержит провала ослабления сигнала, тогда как для второй полосы ($q = 2$) провал расположен в её центре (рис. 2).

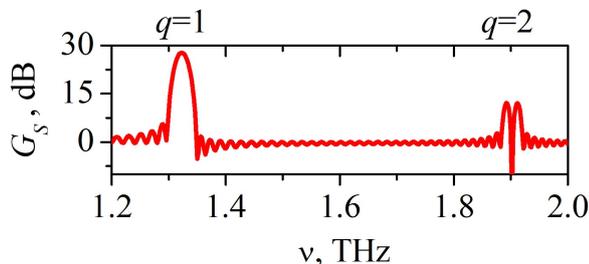


Рис. 2. Коэффициент усиления сигнальной волны при $\varphi_p = 0.05$ рад и $\varphi_m = -1.2$ рад. Остальные параметры см. рис. 1

Fig. 2. Signal wave gain for $\varphi_p = 0.05$ rad and $\varphi_m = -1.2$ rad. Other parameters are shown in Fig. 1

3. Многочастотная модуляция

Одним из недостатков параметрического усиления в полосах модуляционной неустойчивости являются узкие полосы усиления. В работе [16] было показано, что использование сложного профиля модуляции диаметра волокна позволяет расширить полосу ФНУ. Рассмотрим аналогичную задачу для ФЧУ.

Изменение диаметра вдоль волокна было задано суперпозицией трех синусоид с периодом модуляции 40, 40.5 и 41.5 м. Фаза и амплитуда для каждой из синусоид подбирались так, чтобы обеспечить равномерное усиление в полосе от 1.28 до 1.32 ТГц. Изменение дисперсии и нелинейности, соответствующее оптимальным условиям, показано на рис. 3. Оптимизация параметров модуляции позволила получить полосу усиления $q = 1$ с шириной 40 ГГц при неравномерности коэффициента усиления 1 дБ (рис. 4). Величина 40 ГГц почти в два раза превышает ширину полосы усиления (22 ГГц) для волокна с синусоидальной модуляцией дисперсии (см. рис. 1, $q = 1$, $\varphi_p = -0.6$ рад).

Увеличение полосы пропускания сопровождается снижением пикового значения коэффициента усиления. Если для синусоидальной модуляции максимальное значение коэффициента усиления равно 28 дБ (см. рис. 1), то для модуляции, показанной на рис. 3, максимальный коэффициент усиления равен 13 дБ (рис. 4).

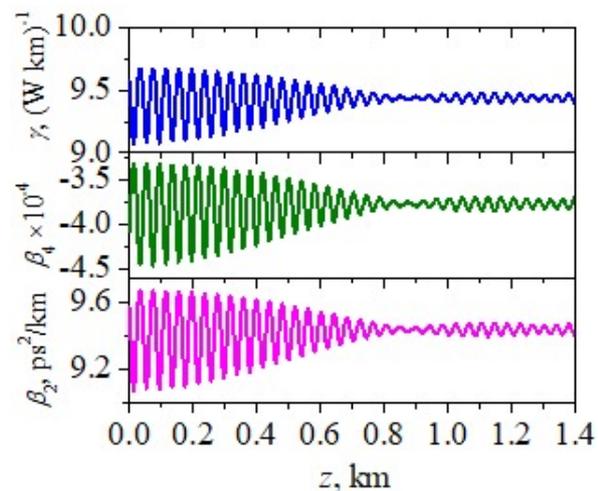


Рис. 3. Дисперсия и нелинейность волокна, оптимизированные для широкополосного усиления сигнала в полосе частот от 1.28 до 1.32 ТГц (цвет онлайн)

Fig. 3. Fiber dispersion and nonlinearity coefficient optimized for broadband amplification in the frequency range from 1.28 to 1.32 THz (color online)



Изменение фазы волны накачки φ_P по-разному влияет на частотное распределение коэффициента усиления в первой ($q = 1$) и во второй ($q = 2$) полосе модуляционной неустойчивости (см. рис. 4). При $\varphi_P = 2.8$ рад провал, связанный с ослаблением сигнала ($G_S < 0$), появляется на краю первой полосы ($q = 1$), тогда как вторая полоса ($q = 2$) содержит провал в своей центральной части.

Для ($q = 2$) увеличение фазы до величины $\varphi_P = 3.6$ рад приводит к появлению двух провалов ослабления сигнала. При этом первая полоса ($q = 1$) содержит только один провал. Его ширина почти в два раза больше (см. рис. 4, $\varphi_P = 3.6$ рад), чем ширина аналогичного провала при синусоидальной модуляции (см. рис. 1, $\varphi_P = 1.0$ рад).

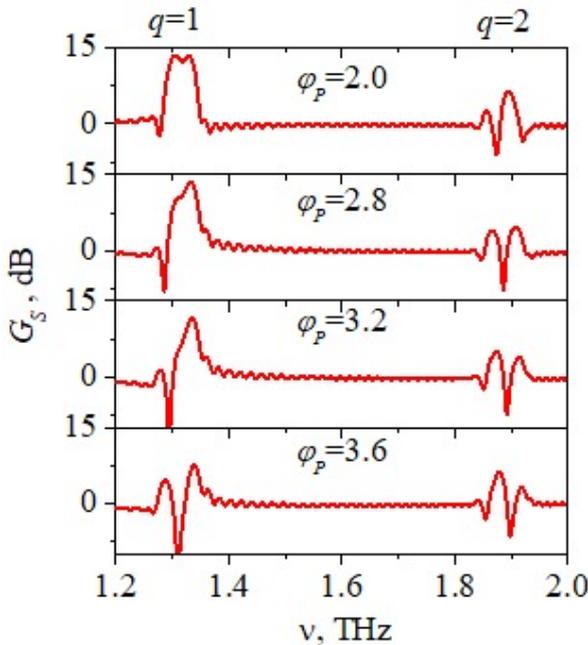


Рис. 4. Коэффициент усиления G_S , рассчитанный для волокна с модуляцией, показанной на рис. 3. Фаза φ_P указана в радианах. Мощность накачки $P_0 = 0.5$ Вт

Fig. 4. The gain G_S calculated for the fiber with the modulation shown in Fig. 3. Phase φ_P is in radians. Pump power is $P_0 = 0.5$ W

На рис. 5 показано фазово-спектральное распределение усиления, рассчитанное для волокна со сложным профилем изменения дисперсии (см. рис. 3). Коэффициент усиления G_S является периодической функцией начальной фазы φ_P . Период равен π . Для $q = 1$ центр полосы усиления соответствует $\varphi_P = -1 \pm \pi, -1 \pm 2\pi, \dots$. Для $q = 2$ центр соответствует другому значению $\varphi_P = -1.87 \pm \pi, -1.87 \pm 2\pi, \dots$. Такая особенность связана с зависимостью коэффициента усиления от фазы модуляции дисперсии.

Как видно из рис. 5, для $q = 1$ линия $\varphi_P = \text{const}$ может пересечь область ослабления сигнала ($G_S < 0$) только один раз. Тогда как для $q = 2$ такая линия может пересечь область $G_S < 0$ два раза, например при $\varphi_P = -2$ рад. Такая особенность приводит к появлению нескольких узких полос ослабления сигнала на фоне широкой полосы усиления, соответствующей $q = 2$.

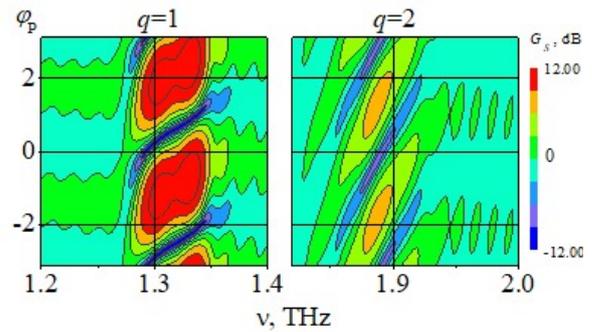


Рис. 5. Фазово-спектральное распределение коэффициента усиления G_S . Параметры указаны на рис. 4 (цвет онлайн)

Fig. 5. Phase-spectral distribution of the gain G_S . The parameters are shown in Fig. 4 (color online)

Заключение

Рассмотрена генерация боковых полос модуляционной неустойчивости в процессе фазочувствительного параметрического усиления в волокнах с периодическим изменением дисперсии. Показано, что фазочувствительный режим усиления может быть реализован при использовании классической схемы, когда сигнальная и холостая волны распространяются совместно с мощной одночастотной накачкой. Показано также, что для фазочувствительного усиления могут использоваться боковые полосы МН высокого порядка. Параметрический коэффициент усиления волокна зависит как от отдельных фаз взаимодействующих волн, так и от фазы модуляции дисперсии. Изменяя фазу, можно управлять положением узких полос ослабления сигнала в пределах широкой полосы МН.

Модуляция дисперсии обеспечивает фазочувствительное усиление при отстройках до нескольких терагерц. Резонансная частота определяется периодом модуляции. Возможность настройки резонансной частоты в широком диапазоне частот является преимуществом такого усилителя. Однако при больших отстройках различие в групповых скоростях взаимодействующих волн приводит к уменьшению эффективности передачи энергии от волны



накачки к сигнальной волне [7]. Для наносекундных импульсов уменьшение эффективности преобразования волн может быть компенсировано использованием непрерывной накачки [7] либо повышением её мощности до нескольких ватт [12]. Однако для пикосекундных сигналов падение усиления за счет рассогласования групповых скоростей представляет серьёзную проблему.

Ширина полосы пропускания определяется законом изменения дисперсии вдоль волокна. Чтобы показать возможность расширения полосы усиления за счет многочастотной модуляции, было рассмотрено волокно, диаметр которого определяется суперпозицией трех синусоид с различным периодом, фазой и амплитудой. Решая задачу оптимизации, авторы статьи получили увеличение ширины полосы пропускания с 22 до 40 ГГц. При этом в пределах одной полосы усиления возможно возникновение нескольких узких полос, соответствующих ослаблению сигнальной волны. Положение полос ослабления сигнала определяется соотношением между фазами волны накачки, сигнальной и холостой волн.

Список литературы

1. Huang J. Parametric amplifiers in optical communication systems: From fundamentals to applications // *Optical amplifiers – a few different dimensions* / ed. P. K. Choudhury. Rijeka : Intech Open, 2018. P. 39–65. <https://doi.org/10.5772/intechopen.73696>
2. Tong Z., Lundstrom C., Andrekson P. A., Karlsson M., Bogris A. Ultralow noise, broadband phase-sensitive optical amplifiers, and their applications // *IEEE J. of Selec. Top. in Quant. Electron.* 2012. Vol. 18, iss. 2. P. 1016–1032. <https://doi.org/10.1109/JSTQE.2011.2136330>
3. Lundstrom C., Corcoran B., Karlsson M., Andrekson P. A. Phase and amplitude characteristics of a phase-sensitive amplifier operating in gain saturation // *Opt. Express*. 2012. Vol. 20, iss. 19. P. 21400–21412. <https://doi.org/10.1364/OE.20.021400>
4. Takanashi N., Inoue A., Kashiwazaki T., Kazama T., Enbutsu K., Kasahara R., Umeki T., Furusawa A. All-optical phase-sensitive detection for ultra-fast quantum computation // *Opt. Express*. 2020. Vol. 28, iss. 23. P. 34916–34926. <https://doi.org/10.1364/OE.405832>
5. Marhic M. E., Andrekson P. A., Petropoulos P., Radic S., Peucheret C., Jazayerifar M. Fiber optical parametric amplifiers in optical communication systems // *Laser & Photonics Reviews*. 2014. Vol. 9. P. 50–74. <https://doi.org/10.1002/lpor.201400087>
6. McKinstrie C. J., Radic S. Phase-sensitive amplification in a fiber // *Opt. Express*. 2004. Vol. 12, iss. 20. P. 4973–4979. <https://doi.org/10.1364/OPEX.12.004973>
7. Agrawal G. P. *Nonlinear fiber optics*. 5th ed. Oxford : Academic Press, 2013. 648 p.
8. Smith N. J., Doran N. J. Modulational instabilities in fibers with periodic dispersion management // *Opt. Lett.* 1996. Vol. 21, iss. 8. P. 570–572. <https://doi.org/10.1364/OL.21.000570>
9. Droques M., Kudlinski A., Bouwmans G., Martinelli G., Mussot A. Dynamics of the modulation instability spectrum in optical fibers with oscillating dispersion // *Phys. Rev. A*. 2013. Vol. 87, iss. 1. P. 013813-7. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.013813>
10. Feng F., Sysoliatin A., Chembo Y. K., Fatome J., Wabnitz S., Finot C. Wavelength conversion and temporal compression of pulse train using dispersion oscillating fibre // *Electronics Letters*. 2014. Vol. 50, iss. 10. P. 768–770. <https://doi.org/10.1049/el.2014.0627>
11. Mussot A., Conforti M., Trillo S., Copie F., Kudlinski A. Modulation instability in dispersion oscillating fibers // *Adv. Opt. Photon.* 2018. Vol. 10, iss. 1. P. 1–42. <https://doi.org/10.1364/AOP.10.000001>
12. Finot C., Fatome J., Sysoliatin A., Kosolapov A., Wabnitz S. Competing four-wave mixing processes in dispersion oscillating telecom fiber // *Opt. Lett.* 2013. Vol. 38, iss. 24. P. 5361–5364. <https://doi.org/10.1364/OL.38.005361>
13. Cappellini G., Trillo S. Third-order three-wave mixing in single-mode fibers: Exact solutions and spatial instability effects // *J. Opt. Soc. Am. B*. 1991. Vol. 8, iss. 4. P. 824–838. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.8.000824>
14. Sysoliatin A. A., Gochelashvili K. S., Konyukhov A. I., Melnikov L. A., Stasyuk V. A. All-optical fiber soliton processing using dispersion oscillating fiber // *Laser Phys. Lett.* 2020. Vol. 17. Article number 065105. P. 1–9. <https://doi.org/10.1088/1612-202X/ab8472>
15. Sysoliatin A., Senatorov A., Konyukhov A., Melnikov L., Stasyuk V. Soliton fission management by dispersion oscillating fiber // *Opt. Express*. 2008. Vol. 15, iss. 25. P. 16302–16307. <https://doi.org/10.1364/OE.15.016302>
16. Fourcade-Dutin C., Bassery Q., Bigourd D., Bendahmane A., Kudlinski A., Douay M., Mussot A. 12 THz flat gain fiber optical parametric amplifiers with dispersion varying fibers // *Opt. Express*. 2015. Vol. 23, iss. 8. P. 10103–10110. <https://doi.org/10.1364/OE.23.010103>

References

1. Huang J. Parametric amplifiers in optical communication systems: From fundamentals to applications. In: Choudhury P. K., ed. *Optical amplifiers – a few different dimensions*. Rijeka, Intech Open, 2018, pp. 39–65. <https://doi.org/10.5772/intechopen.73696>
2. Tong Z., Lundstrom C., Andrekson P. A., Karlsson M., Bogris A. Ultralow noise, broadband phase-sensitive optical amplifiers, and their applications. *IEEE J. of Selec. Top. in Quant. Electron.*, 2012, vol. 18, iss. 2, pp. 1016–1032. <https://doi.org/10.1109/JSTQE.2011.2136330>
3. Lundstrom C., Corcoran B., Karlsson M., Andrekson P. A. Phase and amplitude characteristics of a phase-



- sensitive amplifier operating in gain saturation. *Opt. Express*, 2012, vol. 20, iss. 19, pp. 21400–21412. <https://doi.org/10.1364/OE.20.021400>
4. Takanashi N., Inoue A., Kashiwazaki T., Kazama T., Enbutsu K., Kasahara R., Umeki T., Furusawa A. All-optical phase-sensitive detection for ultra-fast quantum computation. *Opt. Express*, 2020, vol. 28, iss. 23, pp. 34916–34926. <https://doi.org/10.1364/OE.405832>
 5. Marhic M. E., Andrekson P. A., Petropoulos P., Radic S., Peucheret C., Jazayerifar M. Fiber optical parametric amplifiers in optical communication systems. *Laser & Photonics Reviews*, 2014, vol. 9, pp. 50–74. <https://doi.org/10.1002/lpor.201400087>
 6. McKinstrie C. J., Radic S. Phase-sensitive amplification in a fiber. *Opt. Express*, 2004, vol. 12, iss. 20, pp. 4973–4979. <https://doi.org/10.1364/OPEX.12.004973>
 7. Agrawal G. P. *Nonlinear Fiber Optics*. 5th ed. Oxford, Academic Press, 2013. 648 p.
 8. Smith N. J., Doran N. J. Modulational instabilities in fibers with periodic dispersion management. *Opt. Lett.*, 1996, vol. 21, iss. 8, pp. 570–572. <https://doi.org/10.1364/OL.21.000570>
 9. Droques M., Kudlinski A., Bouwmans G., Martinelli G., Mussot A. Dynamics of the modulation instability spectrum in optical fibers with oscillating dispersion. *Phys. Rev. A*, 2013, vol. 87, iss. 1, pp. 013813-7. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1212.5080>
 10. Feng F., Sysoliatin A., Chembo Y. K., Fatome J., Wabnitz S., Finot C. Wavelength conversion and temporal compression of pulse train using dispersion oscillating fibre. *Electronics Letters*, 2014, vol. 50, iss. 10, pp. 768–770. <https://doi.org/10.1049/el.2014.0627>
 11. Mussot A., Conforti M., Trillo S., Copie F., Kudlinski A. Modulation instability in dispersion oscillating fibers. *Adv. Opt. Photon.*, 2018, vol. 10, iss. 1, pp. 1–42. <https://doi.org/10.1364/AOP.10.000001>
 12. Finot C., Fatome J., Sysoliatin A., Kosolapov A., Wabnitz S. Competing four-wave mixing processes in dispersion oscillating telecom fiber. *Opt. Lett.*, 2013, vol. 38, iss. 24, pp. 5361–5364. <https://doi.org/10.1364/OL.38.005361>
 13. Cappellini G., Trillo S. Third-order three-wave mixing in single-mode fibers: Exact solutions and spatial instability effects. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1991, vol. 8, iss. 4, pp. 824–838. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.8.000824>
 14. Sysoliatin A. A., Gochelashvili K. S., Konyukhov A. I., Melnikov L. A., Stasyuk V. A. All-optical fiber soliton processing using dispersion oscillating fiber. *Laser Phys. Lett.*, 2020, vol. 17, article no. 065105, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1088/1612-202X/ab8472>
 15. Sysoliatin A., Senatorov A., Konyukhov A., Melnikov L., Stasyuk V. Soliton fission management by dispersion oscillating fiber. *Opt. Express*, 2008, vol. 15, iss. 25, pp. 16302–16307. <https://doi.org/10.1364/OE.15.016302>
 16. Fourcade-Dutin C., Bassery Q., Bigourd D., Bendahmane A., Kudlinski A., Douay M., Mussot A. 12 THz flat gain fiber optical parametric amplifiers with dispersion varying fibers. *Opt. Express*, 2015, vol. 23, iss. 8, pp. 10103–10110. <https://doi.org/10.1364/OE.23.010103>

Поступила в редакцию 23.12.2022; одобрена после рецензирования 09.01.2023; принята к публикации 15.01.2023
 The article was submitted 23.12.2022; approved after reviewing 09.01.2023; accepted for publication 15.01.2023



БИОФИЗИКА И МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 120–127
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 120–127
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-120-127>, EDN: SHGJIM

Article

***Ex vivo* study of the kinetics of ovarian tissue optical properties under the influence of 40%-glucose**

A. A. Selifonov¹✉, A. S. Rykhlov², V. V. Tuchin³

¹Education and Research Institute of Nanostructures and Biosystems, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

²Clinic "Veterinary Hospital", Saratov State University of Genetics, Biotechnology and Engineering named after N. I. Vavilov, 220, Bolshaya Sadovaya St., Saratov 410012, Russia

³Science Medical Center, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Selifonov Alexey Andreevich, peshka029@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6270-9395>

Andrey Sergeevich Rykhlov, Rychlov.andrej@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1194-9548>

Tuchin Valery Victorovich, tuchinw@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7479-2694>

Abstract. Background and Objectives: The reproductive system of women is a subject of diverse multidisciplinary research worldwide. These are oncological diseases, infertility of an unspecified nature, ovarian cryopreservation to preserve fertility, improvement of early diagnosis of diseases, etc. Elucidation of the mechanisms of diffusion of tissue water and hyperosmotic agents in luteal phase ovarian tissues controlled by angiogenic growth factors can bring us closer to understanding biophysical processes in general. **Materials and Methods.** The work used spectroscopy of diffuse reflection, a free diffusion model and the modified Bouguer–Lambert–Beer law. **Results.** The diffusion coefficient of 40% glucose/tissue water into the ovarian tissue of the luteal phase D and the diffusion time τ have been determined, which was $D = (8.6 \pm 1.4) \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ and $\tau = 50.4 \pm 1.7 \text{ min}$ with a sample thickness of $(0.8 \pm 0.1) \text{ mm}$. The efficiency of optical clearing of cat ovarian tissues with 40% glucose immersion has been determined. **Conclusions.** Studies have shown that 40%-glucose is an effective optical clearing agent for topical use in differentiating normal and pathological ovarian tissues and in clinical applications.

Keywords: ovarian tissues, luteal phase, glucose, total transmittance spectra, diffuse reflectance spectra, diffusion coefficient, optical clearing efficiency

Acknowledgements: The study was financially supported by the Russian Science Foundation under project No. 22-75-00021 dated July 28, 2022.

For citation: Selifonov A. A., Rykhlov A. S., Tuchin V. V. *Ex vivo* study of the kinetics of ovarian tissue optical properties under the influence of 40%-glucose. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 120–127. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-120-127>, EDN: SHGJIM

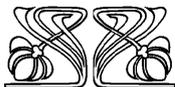
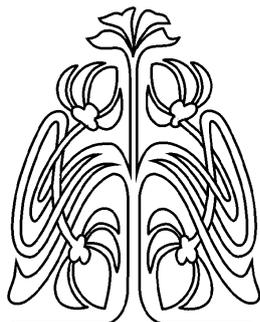
This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC0-BY 4.0)

Научная статья
УДК 535.341.08:535.346.1

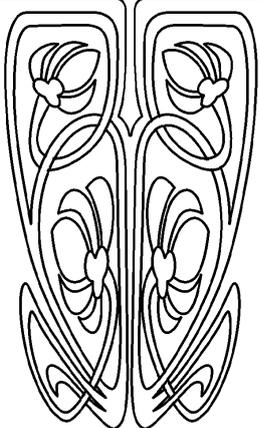
***Ex vivo* исследование кинетики оптических свойств тканей яичников под действием 40%-глюкозы**

A. A. Селифоно́в¹✉, А. С. Рыхло́в², В. В. Тучи́н³

¹Образовательно-научный институт наноструктур и биосистем, Саратовский национальный исследовательский государственный университет, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, Россия



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





²Клиника «Ветеринарная больница», Саратовский государственный университет генетики, биотехнологии и инженерии им. Н. И. Вавилова, ул. Большая Садовая, 220, Саратов 410012, Россия

³Научный медицинский центр, Саратовский национальный исследовательский государственный университет, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, Россия

Селифонов Алексей Андреевич, peshka029@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6270-9395>

Рыхлов Андрей Сергеевич, Rychlov.andrej@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1194-9548>

Тучин Валерий Викторович, tuchinvv@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7479-2694>

Аннотация. Предыстория и цели. Репродуктивная система женщин является предметом разнообразных междисциплинарных исследований во всем мире – это онкологические заболевания, бесплодие неуточненной природы, криоконсервация яичников для сохранения фертильности, совершенствование ранней диагностики заболеваний и др. Выяснение механизмов диффузии тканевой воды и гиперосмотических агентов в тканях лютеиновой фазы яичников, контролируемых ангиогенными факторами роста, может приблизить нас к пониманию биофизических процессов в целом. **Материалы и методы.** В работе использовались спектроскопия диффузного отражения, модель свободной диффузии и модифицированный закон Бугера–Ламберта–Бера. **Результаты.** Определены коэффициент диффузии 40%-ной глюкозы/тканевая вода в ткань яичника лютеиновой фазы D и время диффузии τ , которое составило $D = (8.6 \pm 1.4) \times 10^7 \text{ см}^2/\text{с}$ и $\tau = 50.4 \pm 1.7$ мин при толщине образца (0.8 ± 0.1) мм. Определена эффективность оптического просветления тканей яичников кошки при иммерсии 40%-ной глюкозы. **Выводы.** Исследования показали, что 40%-ная глюкоза является эффективным оптическим просветляющим агентом для местного применения при дифференциации нормальных и патологических тканей яичников и в клинических применениях.

Ключевые слова: ткани яичника, лютеиновая фаза, глюкоза, спектры полного пропускания, спектры диффузного отражения, коэффициент диффузии, эффективность оптического просветления

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда по проекту № 22-75-00021 от 28.07.2022 г.

Для цитирования: Селифонов А. А., Рыхлов А. С., Тучин В. В. Ex vivo исследование кинетики оптических свойств тканей яичников под действием 40%-глюкозы // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 120–127. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-120-127>, EDN: SHGJIM

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Introduction

Ultrasound is one of the most common methods for diagnosing or monitoring treatment. This method of examining the internal reproductive organs is a safe and painless method and is prescribed even during pregnancy [1]. The procedure takes 15–20 minutes and is based on the principles of echolocation, when an ultrasonic signal passes through soft tissues at different speeds and is reflected by tissue inhomogeneities. It is impossible to differentiate by ultrasound: endometrial polyps; small neoplasms; fibroids; benign ovarian tumors from cancer, therefore more research is often needed. Optical radiation is of considerable interest for introduction into clinical practice since it allows for obtaining images with up to the subcellular resolution [2]. The method of laparoscopy with an optical channel is an indispensable modern method in clinical gynecology. Laparoscopy is used both in diagnostics, where the optical channel plays an important role, and for obtaining a biopsy material directly from pathological areas of organs and in surgical operations with the least trauma [3]. When light interacts with tissues, the nature of its propagation is determined by such phenomena as reflection, scattering and absorption. Most tissues are optically turbid media that interfere with imaging of deeper layers. The method of optical clearing (OC) is used

to reduce light scattering in tissues and create their temporary transparency. This phenomenon can be useful to improve the diagnosis or treatment tactics [4–6]. Several studies OC made using various optical clearing agents (OCA) for the treatment of various types of biological tissues to reduce light scattering [7–9].

The OC method is often implemented using hyperosmotic agents: glucose, sorbitol, glycerin, polyethylene glycol, propylene glycol, dimethyl sulfoxide, etc. OC of tissues operates through two main mechanisms: tissue dehydration and alignment of refractive indices of major tissue components and OCAs. Therefore, the determination of the kinetic parameters of fluid flows is an urgent task, both for understanding the mechanisms of OC and for clinical treatment procedures using hyperosmotic agents [6, 10].

Glucose is a good OCA, which is used in various concentrations in the implementation of the OC method [10]. Clarification of the mechanisms of diffusion of tissue water and hyperosmotic agents is of interest not only in improving diagnostic methods, but also in ovarian cryopreservation to preserve fertility in women who are forced to undergo chemotherapy or have anatomical features [11], as well as in the development of new reproductive technologies for the treatment of infertility [12].



In this work, we study the effect of 40%-glucose on the optical properties of the animal ovarian tissue *ex vivo*.

Methodology

The processes occurring in the ovaries are complex and diverse. The whole cycle of changes can be conditionally divided into phases: follicular, ovarian and luteal. The follicular phase is characterized by the maturation and growth of the follicles and the growth of the egg. The ovular phase relates to the release of a mature egg and the rupture of a follicle (Fig. 1). The luteal phase is characterized by the formation of the corpus luteum, a temporary endocrine gland. The corpus luteum functions for only a few (4–7) days and undergoes involution (in the absence of pregnancy). A white body (scar) appears in its place [13]. The blood supply of the mature corpus luteum is the highest of all the organs of the body. Increased blood supply to the ovary containing the corpus luteum is due to angiogenic growth factors, including the development of a large network of capillaries [14].

For histological examination, 5 tissue samples from different cats aged 1–9 years with a diagnosis of “clinically healthy” were used. The halves of each ovary were cut out manually with a scalpel and fixed. The remaining halves of the ovaries were kept frozen until optical measurements were taken. The material for histological examination was prepared no later than 48 hours after oophorectomy and ovariectomy. For tissue fixation, a 10%-buffered

formalin was used. To obtain histological scans, an Aperio AT2 digital slide converter (on-screen diagnostic scanner) equipped with a LED light source and calibration tools was used.

The thickness of tissue histological sections was of 2–3 μm . According to the results of histological studies, it was proved that the selected “normal, unchanged” tissues of the samples contain the corpus luteum and correspond to the luteal phase. The thickness of tissue sections (samples) was measured with a micrometer (Union Source CO, LTD, China), measurements were taken at several points of the sample and averaged. The accuracy of each measurement is ± 0.1 mm. The average thickness of sections of ovarian tissue was (0.8 ± 0.1) mm. To measure the total transmittance spectra (TTS) and diffuse reflectance spectra (DRS) of tissue samples in the spectral range of 200–800 nm, a Shimadzu UV-2550 double-beam spectrophotometer (Japan) with an integrating sphere was used (Fig. 2).

All measurements were carried out at room temperature ($\sim 25^\circ\text{C}$) and normal atmospheric pressure. Each sample of the studied tissue was fixed in a special frame with a window of 0.5×0.5 cm in a quartz cuvette so that the tissue sample was pressed against the wall of the cuvette and subjected to optical measurement. Then, 40%-glucose was added between the sample surface and the cuvette wall, after which measurements were performed until the change in the spectral dependences saturated. We used a pharmaceutical preparation of 40%-glucose aqua solution for injections (Armavir Biofactory,

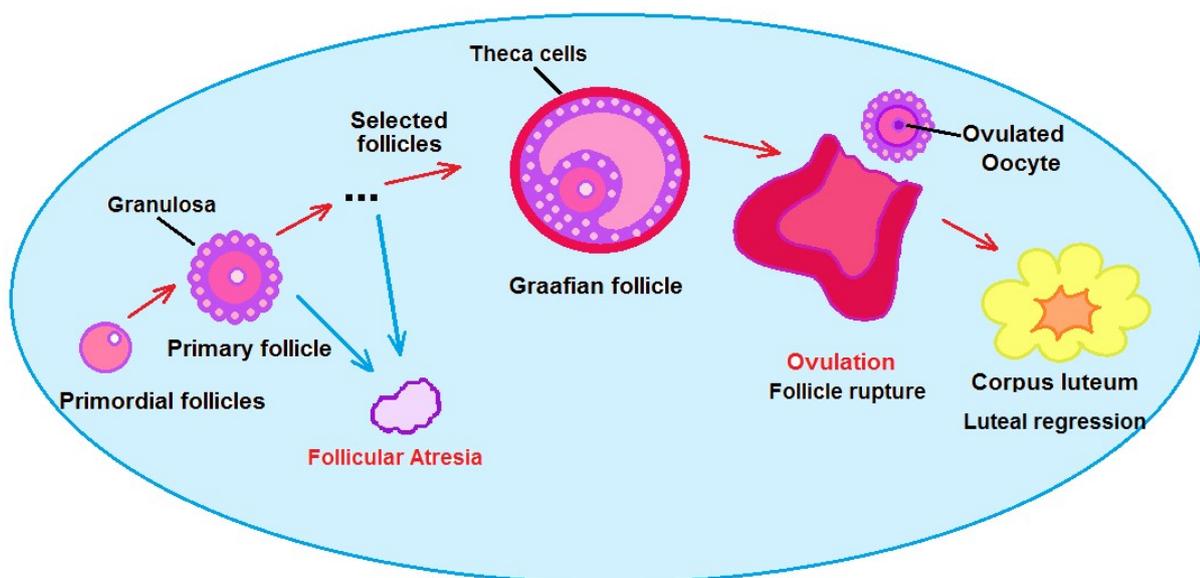


Fig. 1. Schematic representation of the ovarian cycle done using Ref. [13] (color online)

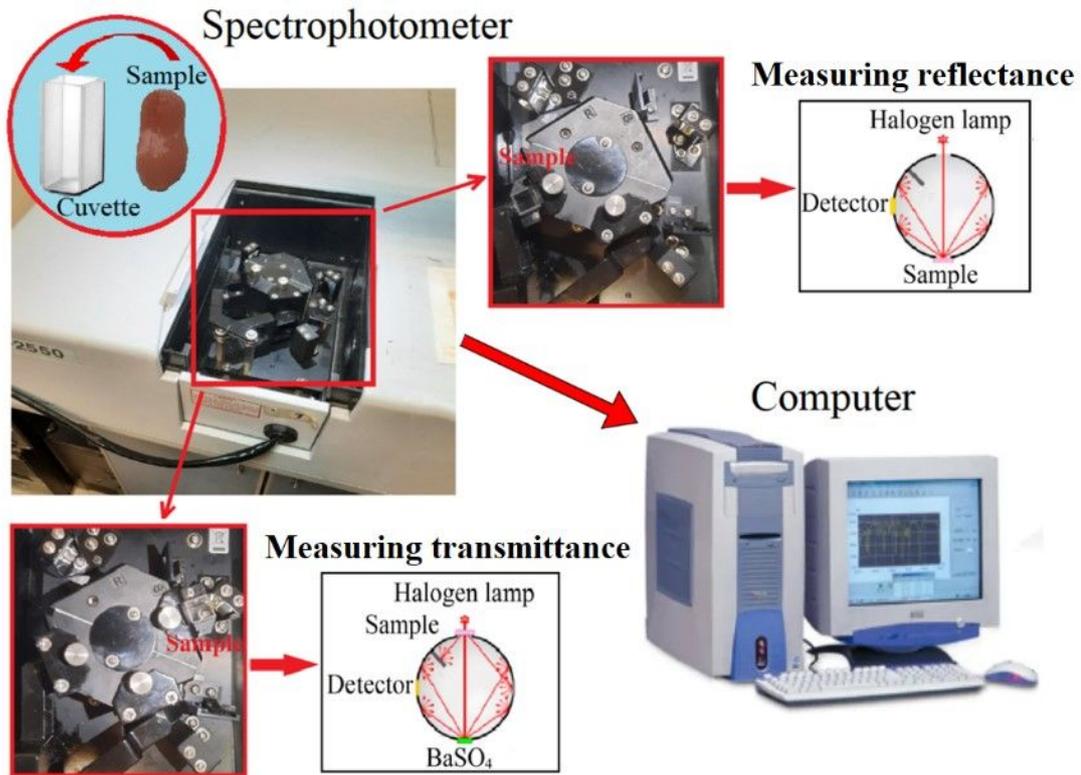


Fig. 2. Scheme of the experimental setup for measuring diffuse reflectance and total transmittance spectra of cat ovarian tissue samples (color online)

Russia). The dehydration of tissue is associated with the outflow of bound intercellular water at the beginning of the interaction with the agent, and the refractive index matching is associated with the agent to flow into the tissue, which generally takes longer time [5] (Fig. 3).

The determination of the tissue diffusion coefficient of glucose/interstitial water is based on the measurement of DRS kinetics. The model of free diffusion was used for calculations [10]. Geometrically, a tissue sample can be represented as a plane-parallel plate of a finite thickness. Using Fick's second law and performing transformations based on the modified Bouguer–Lambert–Beer law [15], we obtain an expression for the difference between the effective optical density at the current time $A(t, \lambda)$ and at the initial time $A(t = 0, \lambda)$:

$$\begin{aligned} \Delta A(t, \lambda) &= A(t, \lambda) - A(t = 0, \lambda) = \\ &= \Delta \mu_{\text{eff}}(t, \lambda) L \sim C_0 \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right\} L, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} I &= I_0 \exp[-\mu_{\text{eff}} L], \mu_{\text{eff}}(t, \lambda) = \\ &= \sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu'_s)} \rightarrow \Delta \mu_{\text{eff}}(t, \lambda), \end{aligned}$$

where the effective optical density is determined from the measurements of DRS:

$$A = -\log R_d; \quad (2)$$

$$\tau = \frac{4l^2}{\pi^2 D}; \quad (3)$$

t is the time in seconds during which the diffusion occurs, λ is the wavelength in nm, $\Delta \mu_{\text{eff}}(t, \lambda)$ is the difference between the effective coefficient of attenuation of light in tissue $\mu_{\text{eff}}(t, \lambda)$ at the current time and at the initial time, 1/cm; L is the average path-length of photons, which in the backscattering mode is $L \cong 2l_d$, $(l_d)^{-1} = \mu_{\text{eff}}$; $\mu'_s = \mu_s(1 - g)$, 1/cm; g is the scattering anisotropy factor (varies from 0 to 1, for many tissues, $g \cong 0.93$) [2]; and for transmission mode $L \cong l$, l is the thickness of the sample, cm; D is the diffusion coefficient of the glucose/interstitial water molecules, cm^2/s ; C_0 is the initial concentration of the glucose, mol/l. The recorded DRS ($R(\lambda)$, %) were converted using the standard Kubelka–Munk algorithm to $A(\lambda)$ extinction spectra (Shimadzu UV-2550 spectrophotometer software). To record the final DRS and TTS after the completion of time-dependent spectra measurement during glucose immersion, tissue samples were placed in clean quartz cuvettes and the spectra were recorded

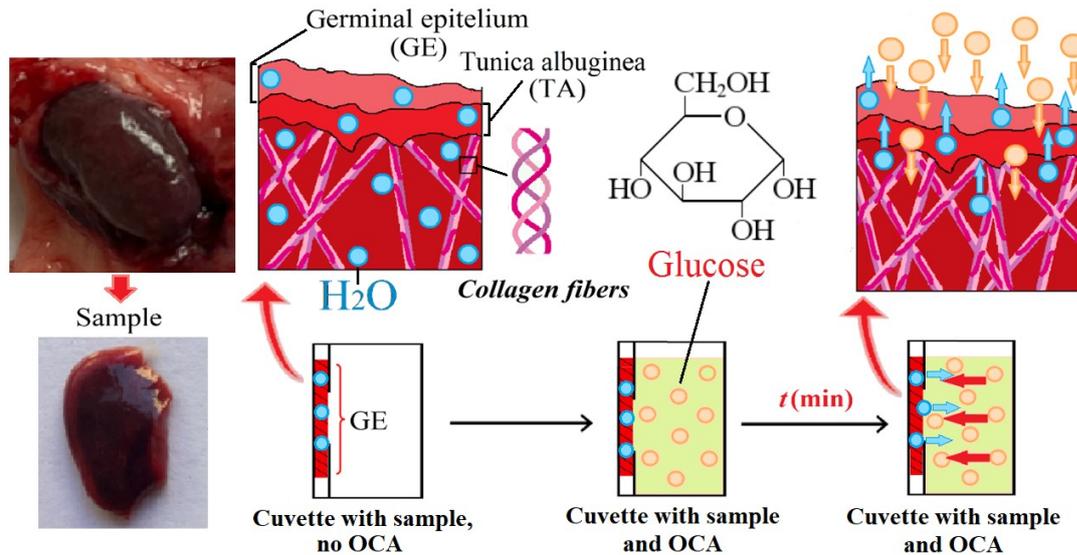


Fig. 3. Diagram showing the interaction of glucose (OCA) with ovarian tissue (color online)

without glucose to observe changes in the spectrum of the sample only, since the spectrum of glucose has absorption maxima in the UV region.

The efficiency of OC (Q) is evaluated [5] as follows:

$$Q(\%) = \{[T(t) - T(t = 0)]/T(t = 0)\}100\%, \quad (4)$$

where $T(t = 0)$ is the tissue sample transmittance at the initial time, $T(t)$ is the current time transmittance.

To determine the confidence interval of the measured values, it is necessary to find the standard deviation (SD) of random measurement errors:

$$SD = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \bar{x})^2}{(n - 1)}}, \quad (5)$$

where x_i is the i value of the sample; \bar{x} is the arithmetic mean of the sample; n is the number of experiments.

The bars on the graphs represent the boundaries of the confidence interval (σ) found as:

$$\sigma = (t_s SD)/(\sqrt{n}), \quad (6)$$

where t_s is the Student's coefficient (table value); SD is the standard deviation, $n = 5$, $p = 95\%$.

To determine if there is a significant difference in the mean values of the diffuse reflectance and the total transmittance spectra of the samples before and after exposure to 40%-glucose, the means were evaluated by using the t -test for paired sets of samples from the standard package of data analysis tools of Microsoft Excel. To do this, for each

wavelength in the range 200–800 nm the experimental data for samples before ($n=5$) and after ($n=5$) OC were compared. The critical test value was found from the table of values for the t -distribution, which corresponds to the critical two-tailed test t_{cd} with a significance level ($\alpha = 0.05$). Student's criterion is determined by the formula:

$$t_s = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{SD_1^2}{n_1} + \frac{SD_2^2}{n_2}}}, \quad (7)$$

where \bar{x}_1 is the mean value for the first set of samples; \bar{x}_2 is the mean value for the second set of samples; n_1 is the number of the first set of samples; n_2 is the number of the second set of samples; SD_1 and SD_2 are the standard deviations for the respective sets of samples and are found from the formula (5).

If the absolute value of the test statistics t_s is greater than t_{cd} , which is the critical value of the test (tabular value corresponding to a two-tailed test with significance level ($\alpha = 0.05$)), then the differences of the means are significant.

Results and discussion

Histological examination of the samples (Fig. 4, a) revealed the cortex and medulla in the structure of the ovaries (Fig. 4, b), as well as the presence of a corpus luteum (Fig. 4, c).

The medulla contains many blood vessels and nerve endings. In the cortical layer there are follicles in which eggs are formed and mature [16].

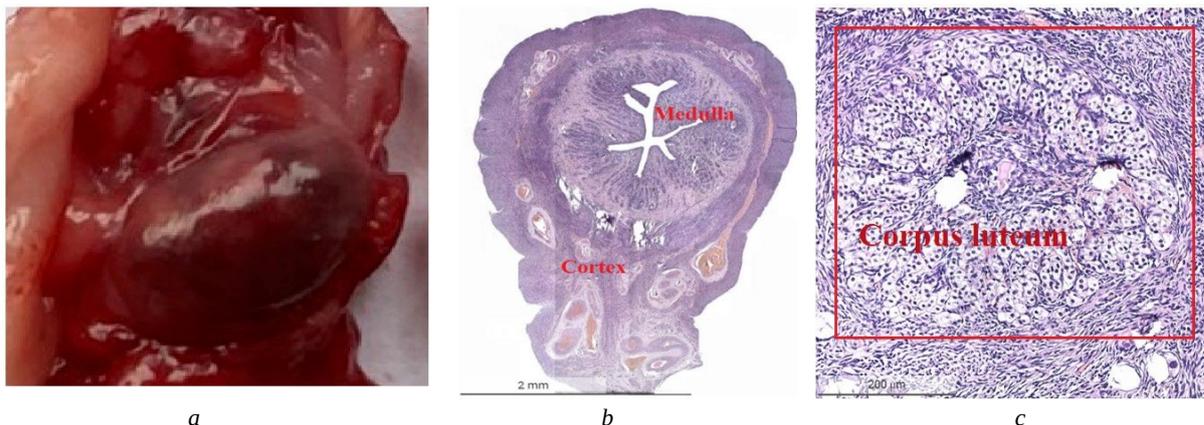


Fig. 4. (a) Photo of the ovary in the corpus luteum phase, (b) histological structure of a section of a cat's ovary (stained with hematoxylin-eosin), and (c) corpus luteum of the ovary (color online)

The DRS of samples of cat ovaries, when interacting with glucose, are shown in Fig. 5, a. In the UV range, the original DRS spectra of ovarian samples have obvious dips characteristic of the absorption bands of amino acid residues of connective tissue proteins in the form of collagen and reticular fibers, hemoglobin and porphyrins, as a result, the tissues are very opaque in the UV range due to light absorption and very strong scattering. In the region of about 415–420 nm and 540–580 nm, the observed dips correspond to the absorption bands of oxyhemoglobin (415, 542, and 576 nm). Water absorption in the measured range of 200–800 nm is insignificant [2].

The corresponding kinetics of the difference in effective optical densities at the current and initial time $\Delta A(t, \lambda)$ was recorded at 700 and 800 nm and then averaged (see Equation (1)) of the studied ovarian samples during glucose application. According to Equation (3), we find τ (diffusion time) which amounted to (50.4 ± 1.7) minutes. The

average diffusion coefficient for ovarian samples ($n = 5$) was $D = (8.6 \pm 1.4) \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$. When studying the diffusion of 40%-glucose in colorectal tissues, the diffusion coefficient was found as $D = 5.8 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ [17], which is very close to data received in this work and evidently the difference is due to differences in the tissue structure, as colorectal tissue is supposed to be more dense and thus less penetrative to molecule diffusion.

The coefficient of diffusion of glucose into human gingival post-mortem no-fixed tissue when implementing the OC method was determined as $D = (4.1 \pm 0.8) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ [18]. Again, the difference between these two tissues can be explained by the features of their structure. For gingival tissue, diffusion is faster due to a well-developed blood capillary network. The diffusion coefficient of glycerol/tissue water in the liver was $D = 8.2 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ [19]. Some differences in the diffusion rate could be due to differences in movable water content in the particular tissue [6, 10, 17, 19].

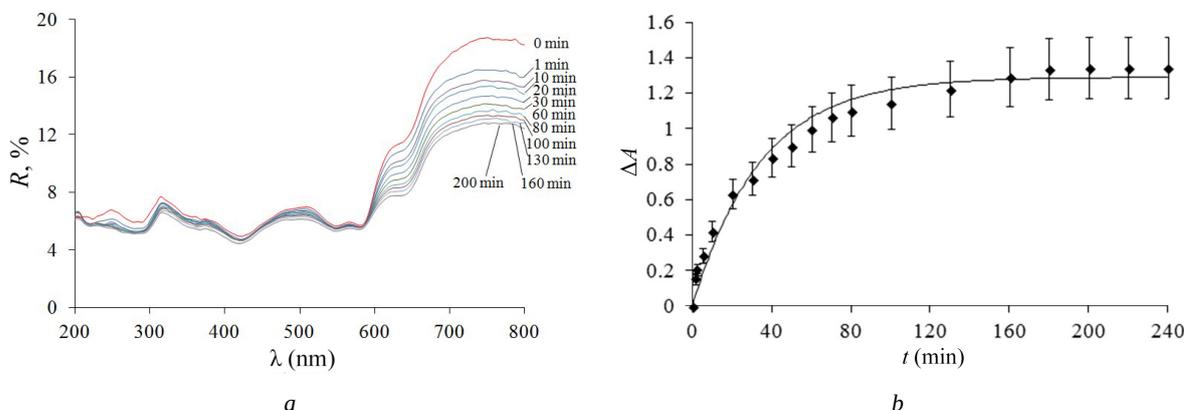


Fig. 5. (a) DRS of cat ovarian tissue samples when immersed in 40%-glucose, (b) difference in effective optical densities (experimental data (symbols) and their approximation (solid curve))



The DRS of ovaries of cats at the initial time and at the end of protocol are shown in Fig. 6, *a*. In the entire studied wavelength range from 200 to 800 nm, the diffuse reflectance decreases within 200 minutes of glucose action, which indicates a decrease in scattering and absorption by biological tissue. This effect is explained by two factors: the outflow of intracellular water together with hemoglobin from the tissue due to osmosis and the diffusion of glucose into the tissue. The TTS of the tissue sample at the initial moment and after its immersion for 200 min in glucose are shown in Figs. 6, *b*, *c*. The total transmittance increases over

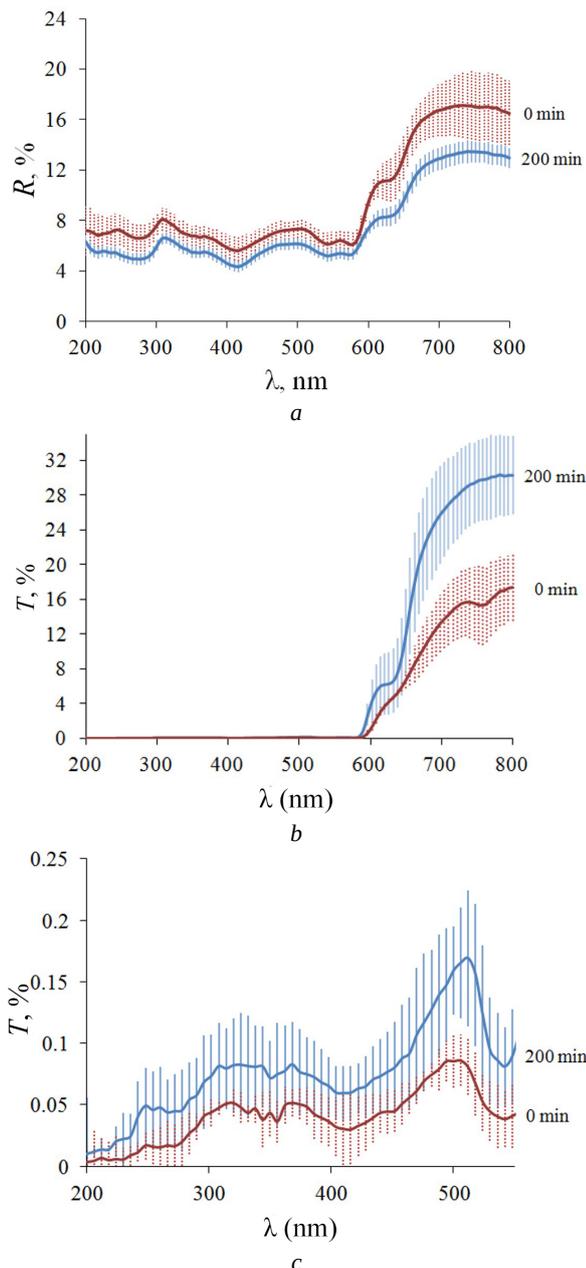


Fig. 6. DRS (*a*) and TTS (*b*, *c*) of cat ovary tissue before and after immersion in glucose in the range from 200 to 800 nm

the entire spectral range. In the region from 200 to 600 nm, the absolute value of the total transmittance does not exceed 0.2%, which may be associated with a significant developed ovarian capillary network in the luteal phase.

For the diffuse reflectance spectrum, t_{cd} over the entire wavelength range takes values from 2.36 to 2.57, which is less than $t_{st} = 3.3-8.7$, thus the differences of the means are significant. For the total transmittance spectra in the range from 200 to 490 nm, $t_{cd} = 2.3-2.6$, which is more than $t_{st} = 0.5-2.0$, thus the differences in the means of total transmittance spectra before and after 40%-glucose action are insignificant. In the range of 490–800 nm, $t_{cd} = 2.3-2.8$, which is less than the obtained values $t_{st} = 3.8-7.5$, therefore, the differences in the means are significant. Thus, enough evidence has been obtained to say that there is a statistically significant difference between the means of diffuse reflectance spectra (at 200–800 nm) and total transmittance spectra (at 490–800 nm) before and after exposure to 40%-glucose.

After keeping the samples in 40%-glucose for 200 min, the transmittance increases over the entire wavelength range. The values of the efficiency of OC of the cat ovarian tissue under the influence of 40% glucose, calculated according to Eq. (4), are shown in Fig. 7.

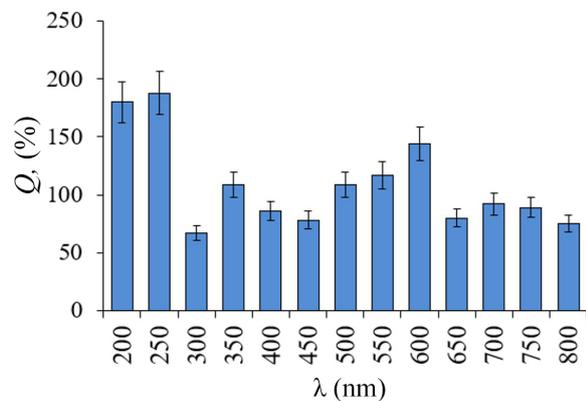


Fig. 7. Efficiency of OC of cat ovarian tissue by immersion in 40%-glucose

In the UV range, the efficiency of OC of cat ovarian tissue with glucose reaches 200%, at 550 nm it reaches 130%, at 600 nm – 150% and 700–800 nm – 80% (see Fig. 7).

Conclusion

The use of optical clearing technology reduces scattering and absorption of light by tissues and, as a result, improves its penetration into deeper tissue structures. The studies have shown that



40%-glucose is an effective OCA for topical use. Quantitative kinetic data of glucose impact will be of interest for further study of the amount of free and bound water in ovarian tissues, in the differentiation of normal and pathological ovarian tissues and in clinical applications.

References

- Pervaiz S., Naem M., Ali A., John A., Batool N. Frequency of uterine anomalies associated with persistent miscarriages in pregnancy on ultrasound: Uterine anomalies associated with persistent miscarriages. *Pakistan Journal of Health Sciences*, 2022, vol. 4, pp. 55–58. <https://doi.org/10.54393/pjhs.v3i01.54>
- Tuchin V. V. *Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical Diagnostics*. 3rd ed. Bellingham, SPIE Press, 2015. 988 p.
- Nian L., Yang D-H., Zhang J., Zhao H., Zhu C-F., Dong M-F., Ai Y. Analysis of the clinical efficacy of laparoscopy and hysteroscopy in the treatment of tubal-factor infertility. *Front. Med.*, 2021, vol. 7, article no. 712222. <https://doi.org/10.3389/fmed.2021.712222>
- Khan M. H., Choi B., Chess S., Kelly K. M., McCullough D., Nelson D. S. Optical clearing of in vivo human skin: Implications for light-based diagnostic imaging and therapeutics. *Lasers in Surgery and Medicine*, 2004, vol. 34, no. 2, pp. 83–85.
- Tuchin V. V. *Optical Clearing of Tissues and Blood*. SPIE Press, Bellingham, USA, 2006. 254 p.
- Oliveira L. M. C., Tuchin V. V. *The Optical Clearing Method – A New Tool for Clinical Practice and Biomedical Engineering*. Springer, Cham, Switzerland, 2019. 188 p.
- Tuchina D. K., Timoshina P. A., Tuchin V. V., Bashkatov A. N., Genina E. A. Kinetics of Rat Skin Optical Clearing at Topical Application of 40% Glucose: Ex Vivo and In Vivo Studies. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2019, vol. 25, no. 1, pp. 1–8. <https://doi.org/10.1109/JSTQE.2018.2830500>
- Oliveira L. R., Ferreira R. M., Pinheiro M. R., Silva H. F., Tuchin V. V., Oliveira L. M. Broadband spectral verification of optical clearing reversibility in lung tissue. *Journal of Biophotonics*, 2023, vol. 16, no. 1, pp. e202200185. <https://doi.org/10.1002/jbio.202200185>
- Carneiro I., Carvalho S., Henrique R., Selifonov A., Oliveira L., Tuchin V. V. Enhanced ultraviolet spectroscopy by optical clearing for biomedical applications. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2021, vol. 27, no. 4, pp. 1–8. <https://doi.org/10.1109/JSTQE.2020.3012350>
- Tuchin V. V., Zhu D., Genina E. A. *Handbook of Tissue Optical Clearing: New Prospects in Optical Imaging*. Boca Raton, CRC Press, 2022. 688 p.
- Lee S., Ozkavukcu S., Ku S. Y. Current and future perspectives for improving ovarian tissue cryopreservation and transplantation outcomes for cancer patients. *Reproductive Sciences*, 2021, vol. 28, no. 6, pp. 1746–1758. <https://doi.org/10.1007/s43032-021-00517-2>
- Abbara A., Jayasena C. N., Christopoulos G., Narayanaswamy S., Izzi-Engbeaya C., Nijher G. M. K., Comminos A. N., Peters D., Buckley A., Ratnasabapathy R., Prague J. K., Salim R., Lavery S. A., Bloom S. R., Szigeti M., Ashby D. A., Trew G. H., Dhillon W. S. Efficacy of kisspeptin-54 to trigger oocyte maturation in women at high risk of ovarian hyperstimulation syndrome (OHSS) during in vitro fertilization (IVF) therapy. *Journal of Clinical Endocrinology and Metabolism*, 2015, vol. 100, no. 9, pp. 3322–3331. <https://doi.org/10.1210/jc.2015-2332>
- Burkman R. T. Atlas of pelvic anatomy and gynecologic surgery. *The Journal of the American Medical Association*, 2011, vol. 306, no. 18, pp. 2031–2038. <https://doi.org/10.1001/jama.2011.1635>
- Smith M. F., McIntush E. W., Smith G. W. Mechanisms associated with corpus luteum development. *Journal of Animal Science*, 1994, vol. 72, no. 7, pp. 1857–1872. <https://doi.org/10.2527/1994.7271857x>
- Genina E. A., Bashkatov A. N., Tuchin V. V. Tissue optical immersion clearing. *Expert Review of Medical Devices*, 2010, vol. 7, no. 6, pp. 825–842. <https://doi.org/10.1586/erd.10.50>
- Worne F. Color atlas of veterinary anatomy. Volume 3: The dog and cat. *Australian Veterinary Journal*, 2011, vol. 89, no. 5, pp. 124–136. <https://doi.org/10.1111/j.1751-0813.2010.00675>
- Carvalho S., Gueiral N., Nogueira E., Henrique R., Oliveira L., Tuchin V. V. Glucose diffusion in colorectal mucosa – a comparative study between normal and cancer tissues. *Journal of Biomedical Optics*, 2017, vol. 22, no. 9, pp. 91506. <https://doi.org/10.1117/1.JBO.22.9.091506>
- Selifonov A. A., Tuchin V. V. Determination of the diffusion coefficient of 40%-glucose in human gum tissue by optical method. *Optics and Spectroscopy*, 2020, vol. 128, no. 6, pp. 766–770.
- Carneiro I., Carvalho S., Henrique R., Oliveira L., Tuchin V. V. Simple multimodal optical technique for evaluation of free/bound water and dispersion of human liver tissue. *Journal of Biomedical Optics*, 2017, vol. 22, no. 12, pp. 1–10. <https://doi.org/10.1117/1.JBO.22.12.125002>

Поступила в редакцию 23.12.2022; одобрена после рецензирования 14.03.2023; принята к публикации 20.03.2023
The article was submitted 23.12.2022; approved after reviewing 14.03.2023; accepted for publication 20.03.2023



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 128–140

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 128–140

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-128-140>, EDN: WTBLCR

Научная статья

УДК 57.087.3:612.1

Оценка пространственно-временной неоднородности двухмерных изображений на примере фотоплетизмографической визуализации гемодинамики



А. А. Сагайдачный[✉], И. Ю. Волков, М. О. Цой, А. В. Фомин, Д. И. Майсков, А. В. Антонов, И. С. Залетов, А. В. Скрипаль

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Сагайдачный Андрей Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры медицинской физики, andsag@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5296-1968>

Волков Иван Юрьевич, аспирант кафедры медицинской физики, volkovivan27@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0506-0606>

Цой Мария Олеговна, кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры оптики и биофотоники, dethaos@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4681-6465>

Фомин Андрей Владимирович, кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры медицинской физики, 89050344175@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-8317>

Майсков Дмитрий Игоревич, аспирант кафедры медицинской физики, dmayсков@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3487-2590>

Антонов Андрей Валерьевич, студент Института физики, antonovav29012003@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7710-1577>

Залетов Иван Сергеевич, аспирант кафедры медицинской физики, izaletov25@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1419-7372>

Скрипаль Анатолий Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой медицинской физики, skripalav@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9080-0057>

Аннотация. В процессе обработки серии двухмерных изображений в пространственно-временной и частотно-временной областях возникает проблема отображения многомерных результатов на двумерной плоскости. При реализации частотно-временного анализа каждую точку объекта характеризует функция двух аргументов, поэтому для визуализации результатов на двумерной плоскости необходимо уменьшение размерности данных. В настоящей работе описан метод цветового картирования корреляции спектральных характеристик в каждой точке двухмерного динамического изображения. Новизна предложенного метода состоит в использовании функции вейвлет-корреляции сигнала опорной (референсной) зоны с сигналами во всех других зонах интереса объекта. При этом значение корреляции кодируется цветом и формирует корреляционную карту в каждом из анализируемых частотных диапазонов. Это позволяет выделить зоны, имеющие похожие частотно-временные спектры исследуемой характеристики объекта. Применение предложенного метода рассмотрено на примере анализа микрогемодинамики кисти здорового человека с помощью фотоплетизмографической визуализации. Анализ проведен в диапазоне частот (0.005–2 Гц), охватывающем как сердечные (пульсовые), так и более низкочастотные гемодинамические колебания дыхательного, миогенного, нейрогенного и эндотелиального диапазонов. В целом отмечается тенденция к уменьшению корреляции спектров при удалении от референсной зоны и при уменьшении анализируемой частоты сигнала. Показано, что фотоплетизмографические сигналы, регистрируемые в области дистальной фаланги пальца, репрезентативны преимущественно в отношении пульсовых колебаний микрогемодинамики других зон кисти (корреляция около 0.7) и в значительно меньшей степени в отношении эндотелиальных, нейрогенных, миогенных и дыхательных колебаний (корреляция около 0.4). Вследствие установленной высокой пространственной неоднородности спектральных характеристик рекомендуется при использовании контактных фотоплетизмографических измерений использовать несколько опорных зон. Рассмотренный способ визуализации пространственной корреляции спектральных характеристик может найти практическое применение также в области анализа гемодинамики методами лазерной доплеровской, лазерной спекл-контрастной, термографической или гиперспектральной визуализации.

Ключевые слова: фотоплетизмография, фотоплетизмографическая визуализация, визуализирующая фотоплетизмография, вейвлет, корреляция, гемодинамика, микрогемодинамика, спектральный анализ

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (грант № МК-140.2021.4).

Для цитирования: Сагайдачный А. А., Волков И. Ю., Цой М. О., Фомин А. В., Майсков Д. И., Антонов А. В., Залетов И. С., Скрипаль А. В. Оценка пространственно-временной неоднородности двухмерных изображений на примере фотоплетизмографической визуализации гемодинамики // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 128–140. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-128-140>, EDN: WTBLCR

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)



Article

Assessment of spatiotemporal heterogeneity of two-dimensional images on the example of photoplethysmographic imaging of hemodynamics**A. A. Sagaidachnyi[✉], I. Yu. Volkov, M. O. Tsoy, A. V. Fomin, D. I. Mayskov, A. V. Antonov, I. S. Zaletov, A. V. Skripal**

Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Andrey A. Sagaidachnyi, andsag@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5296-1968>Ivan Yu. Volkov, volkovivan27@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0506-0606>Maria O. Tsoy, dethaos@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4681-6465>Andrey V. Fomin, 89050344175@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-8317>Dmitriy I. Mayskov, dmayskov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3487-2590>Andrey V. Antonov, antonovav29012003@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7710-1577>Ivan S. Zaletov, izaletov25@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1419-7372>Anatoly V. Skripal, skripalav@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9080-0057>

Abstract. Background and Objectives: The problem of representation of multidimensional data on a two-dimensional plane arises during the processing of a series of two-dimensional images in the spatiotemporal and time-frequency domains. When implementing time-frequency analysis, each point of the object is characterized by a function of two arguments, therefore, to visualize the results on a two-dimensional plane, it is necessary to reduce the data dimension. **Materials and Methods:** This paper describes a method for color coding the correlation of spectral features at each point of a two-dimensional dynamic image. The novelty of the proposed method is the using of the wavelet correlation function of the reference area with all other regions of interest of the object. In this case, the correlation value is color-coded and forms a correlation map in each of the analyzed spectral ranges. **Results:** This allows to select areas that have similar time-frequency spectra of investigated characteristics of the object. The application of the method is considered on the example of the analysis of the microhemodynamics of the human hand using photoplethysmographic imaging. The analysis was carried out in the spectral range (0.005–2 Hz), covering both cardiac and low-frequency hemodynamic oscillations of the respiratory, myogenic, neurogenic, and endothelial ranges. In general, there is a tendency to a decrease of correlation of the spectrum with distance from the reference area and with a decrease in the analyzed signal frequency. It is shown that photoplethysmographic signals recorded in the area of the distal phalanx of the finger are predominantly representative of cardiac oscillations in microhemodynamics of other areas of the hand (correlation of about 0.7) and less representative with respect to endothelial, neurogenic, myogenic and respiratory oscillations (correlation of about 0.4). Due to the established high spatial inhomogeneity of the spectral features, it is recommended to use several reference areas when using contact photoplethysmographic measurements. **Conclusion:** The considered method of visualizing the spatial correlation of spectral features can find practical application also in the field of hemodynamic analysis using laser Doppler, laser speckle contrast, thermographic or hyperspectral imaging.

Keywords: photoplethysmography, photoplethysmographic imaging, imaging photoplethysmography, wavelet, correlation, hemodynamics, microhemodynamics, spectral analysis

Acknowledgments: This work was funded by the Grant Council of the President of the Russian Federation for the state support of young Russian scientists – candidates of sciences (MK-140.2021.4).

For citation: Sagaidachnyi A. A., Volkov I. Yu., Tsoy M. O., Fomin A. V., Mayskov D. I., Antonov A. V., Zaletov I. S., Skripal A. V. Assessment of spatiotemporal heterogeneity of two-dimensional images on the example of photoplethysmographic imaging of hemodynamics. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 128–140 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-128-140>, EDN: WTBLCR

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Для полного описания эволюции двухмерных данных, регистрируемых методами визуализации гемодинамики, например, такими как термографическая визуализация, фотоплетизмографическая (ФПГ), лазерная-доплеровская, спекл-контрастная визуализация [1], необходимо учитывать пространственный, временной и частотный аспекты динамики. Размерность результатов пространственно-временного анализа двухмерных данных может быть выше двух, что приводит к необходимости уменьшения размерности результатов с целью сохранить наглядность представления результатов, особенно в случае мульти- и гиперспектральной визуализации [2, 3].

Одним из широко распространенных методов уменьшения размерности двухмерных данных во времени является выделение области интереса и усреднение параметра визуализации по пространству. При этом в область интереса могут попадать анатомические зоны, различающиеся по физиологическим механизмам регуляции, например, регуляции гемодинамики и потоотделения, как было показано в работах [4–6]. Такие «смешанные» данные будут иметь большую дисперсию во времени по сравнению с анализом точек поверхности, имеющих один и тот же механизм регуляции.

Вторым способом уменьшения размерности данных является усреднение параметра визуализации



зации по времени в каждой точке изображения. В результате формируется функциональное изображение, карта, содержащая интегральную информацию о пространственном распределении, например гемодинамики за всё время эксперимента [4, 7, 8]. При усреднении по пространству или по времени можно выполнять оценку статистического распределения параметра визуализации, т. е. в случае распределения, близкого к нормальному, определять математическое ожидание, дисперсию, коэффициенты асимметрии или эксцесса. Широко распространен анализ спектральных составляющих сигнала в каждой точке или области изображения с привлечением аппарата Фурье- или вейвлет-анализа [9].

Обобщая вышесказанное, можно представить анализируемые данные о гемодинамике как функцию четырех аргументов $S(x, y, f, t)$, где x, y – пространственные координаты, t – время, f – частота. Таким образом, в каждой точке изображения существует динамика во временной и частотной областях, проявляющаяся, например, в случае вейвлетного анализа данных. Статистические характеристики можно оценивать в пространственной, временной, частотной областях или их сочетании. Уменьшая размерность результата за счет фиксации одного или нескольких аргументов функции $S(x, y, f, t)$, полу-

чим различные виды анализа (таблица). При этом данные в частотной и временной областях не являются полностью независимыми. Оценивая пару возможных дискретных экспериментальных значений частоты и времени, следует учитывать соотношение неопределенности для спектрального анализа, в соответствии с которым уменьшение шага дискретизации по времени (увеличение определенности по времени) будет необходимо приводить к увеличению минимального шага дискретизации по частоте (уменьшению определенности по частоте). И наоборот, увеличение частотного разрешения будет сопровождаться необходимым уменьшением временного.

На практике наиболее часто используются 5 вариантов анализа: временной, пространственно-временной, пространственный, пространственно-частотный, частотно-временной (строки 1, 7, 6, 4, 3 таблицы соответственно). При выполнении анализа в частотной области имеется в виду анализ спектра амплитуд и/или спектра фаз (например, модуль или аргумент комплексных Фурье- или вейвлет-коэффициентов соответственно).

При статистическом анализе данных во временной, пространственной или частотной областях появляются дополнительные количественные характеристики, описывающие статистическое распределение вероятностей в соответствую-

Возможные виды анализа двумерных изображений (0 – постоянное значение соответствующего аргумента функции S , 1 – переменное значение соответствующего аргумента функции S)

Table 1. Possible types of analysis of two-dimensional images (0 – constant value of the corresponding argument function S , 1 – variable value of the corresponding argument function S)

№	$S(x, y)$	$S(f)$	$S(t)$	Описание вида анализа / Description of the analysis type
0	0	0	0	Нет динамики в пространственной, частотной и временной областях / There is no dynamics in the spatial, frequency and time domains
1	0	0	1	$S(t)$ – динамика сигнала во времени в фиксированной точке или группе точек (зоне) на фиксированной частоте / $S(t)$ – signal dynamics in time at a fixed point or a group of points (area) at a fixed frequency
2	0	1	0	Нет динамики в пространственной и временной областях / There is no dynamics in the spatial and temporal domains
3	0	1	1	$S(f, t)$ – частотно-временной анализ в точке, группе точек (зоне) в диапазоне частот / $S(f, t)$ – time-frequency analysis at a point, a group of points (area) in the frequency range
4	1	0	0	$S(x, y)$ – анализ пространственных частот кадра на фиксированной частоте (пространственно-частотный анализ) / $S(x, y)$ – analysis of the spatial frequencies of the frame at a fixed frequency (spatial-frequency analysis)
5	1	0	1	$S(x, y, t)$ – пространственно-временной анализ на фиксированной частоте / $S(x, y, t)$ – spatiotemporal analysis at a fixed frequency.
6	1	1	0	$S(x, y, f)$ – анализ пространственных частот кадра в диапазоне частот (пространственный анализ в диапазоне частот) / $S(x, y, f)$ – analysis of the spatial frequencies of the frame in the frequency range (spatial analysis in the frequency range)
7	1	1	1	$S(x, y, f, t)$ – пространственно-временной анализ в диапазоне частот / $S(x, y, f, t)$ – spatiotemporal analysis in the frequency range.



ющих областях (среднее значение/медиана, среднеквадратичное отклонение (СКО)/квартили, коэффициенты асимметрии, эксцесса и т. п.). Например, при вычислении спектральной плотности мощности фотоплетизмографических сигналов возможно проводить усреднение по времени, по частоте или по пространству, визуализируя цветом пространственное распределение соответствующих значений СКО.

Визуализация периферической гемодинамики демонстрирует пространственную неоднородность амплитудных и фазовых характеристик сигнала [1, 10], поэтому при проведении исследований в локальных зонах поверхности [11] желательно определять анатомические зоны регистрации сигналов, опираясь на результаты предварительного пространственно-временного анализа.

В области двухмерной визуализации гемодинамических явлений методами спекл-контрастной или фотоплетизмографической визуализации (ФПГ-визуализации) исследователи, за исключением нескольких работ [12, 13], ограничиваются построением карты амплитуды колебаний в каждой точке поверхности объекта, не давая количественных оценок взаимосвязи спектров колебаний сигнала в различных точках объекта [14, 15], либо выполняя сравнение данных контактных измерений с двухмерными бесконтактными [16]. **Цель данной работы** состоит в разработке метода цветового картирования корреляции частотно-временных спектров в различных точках двухмерного изображения на примере обработки результатов ФПГ-визуализации микрогемодинамики (такой анализ соответствует 7-й строке таблицы).

Большинство исследований гемодинамики с помощью метода фотоплетизмографии проводятся в частотном диапазоне сердечных сокращений (0.5–2 Гц). Обзор современных работ в области фотоплетизмографии [15] показал, что низкочастотная часть сигнала ФПГ менее 0.5 Гц является информативной с точки зрения описания функций симпатического отдела вегетативной нервной системы, а также изучения корреляции колебаний микрогемодинамики и вариабельности ритма сердца [17–24]. Поэтому в данной работе проводился анализ ФПГ-сигнала в диапазоне частот (0.005–2 Гц), охватывающем как пульсовые колебания, так и более низкочастотные компоненты дыхательного, миогенного, нейрогенного и эндотелиального диапазонов.

1. Материалы и методы

1.1. Регистрация данных

ФПГ-визуализация микрогемодинамики выполнялась с помощью регистрации видеоизображения монохромной камерой Basler acA 2000–165um NIR (Германия) с рабочим диапазоном в видимой и ближней инфракрасной областях (400–1000 нм). В качестве объекта исследования использовалась тыльная сторона кисти человека. Для освещения кисти использовался кольцевой осветитель со светодиодами, имеющими центральную длину волны излучения 530 нм (зеленый). Камера и кольцевой осветитель располагались на расстоянии 70 см от объекта измерения. Для минимизации зеркально отраженной компоненты излучения использовались поляризационные фильтры. Съемка видеоизображения проводилась с частотой 50 Гц, разрешением камеры 720×480 пикселей и физическим разрешением объекта 14 пикселей/мм². Длительность записи составляла 18 мин. Съемка осуществлялась в помещении, в термонейтральных условиях (влажность 40±5%, температура воздуха 23.0 ± 0.2°C) при отсутствии форсированной конвекции. Испытуемый – мужчина 30 лет, без вредных привычек, без системных заболеваний, сопровождающихся нарушением регуляции периферического кровотока, при артериальном давлении в норме (125/83 мм рт. ст.). Во время съемки испытуемый находился в состоянии покоя в положении сидя.

1.2. Частотно-временной анализ

Для анализа неоднородности частотно-временных характеристик сигнала $f(x, y, t)$ в различных точках поверхности объекта использовалось вейвлет-преобразование (1) с анализирующим вейвлетом Морле (2). При соответствующем подборе параметра ω_0 вейвлета Морле можно обеспечить оптимальное соотношение между локализацией в частотной и временной областях [25]:

$$W(s, \Delta t, x, y) = \frac{1}{\sqrt{s}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y, t) \cdot \Psi^* \left(\frac{t - \Delta t}{s} \right) dt, \quad (1)$$

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot e^{(i \cdot \omega_0 \cdot r)} \cdot e^{(-r^2/2)}, \quad (2)$$

$$r = \frac{t - \Delta t}{s},$$

где символ * обозначает комплексное сопряжение; s – масштаб, имеющий размерность времени



и обратно пропорциональный частоте сигнала; Δt – временной сдвиг (положение вейвлета); x, y – координаты изображения; t – время сигнала; ω_0 – параметр вейвлета (использовалось значение $\omega_0 = 2\pi$, которое обеспечивало обратно пропорциональное соотношение между линейной частотой и масштабом вейвлета $f = 1/s$).

Для определения корреляции частотно-временных спектров в двух различных точках изображения объекта использовалась функция (3), представляющая собой нормализованное скалярное произведение двух вейвлет-спектров, определенное для каждого значения частоты f [9, 26, 27]. В дискретном виде такая функция корреляции вейвлет-спектров может быть записана как

$$CC(f_i) = \frac{\sum_{j=1}^N W_1(f_i, t_j) \cdot W_2^*(f_i, t_j)}{\sqrt{\sum_{j=1}^N |W_1(f_i, t_j)|^2 \cdot \sum_{j=1}^N |W_2(f_i, t_j)|^2}}, \quad (3)$$

где i – индекс дискретного значения частоты f_i , j – индекс дискретного значения времени t_j , $W_1(f_i, t_j)$ – вейвлет-спектр в точке изображения (x_1, y_1) , $W_2^*(f_i, t_j)$ – комплексно-сопряженный вейвлет-спектр в точке изображения (x_2, y_2) , N – количество дискретных значений времени, $f = 1/s$. Модуль функции (3) характеризует корреляцию спектральных компонент двух сигналов на частоте f_i и принимает значения в диапазоне (0; 1).

1.3. Цветовое картирование пространственной корреляции спектров

Для визуализации корреляции вейвлет-спектров в различных точках двумерного изображения необходимо определить каким образом будут осуществляться выбор различных пар точек изображения и цветовое кодирование коэффициентов корреляции. В соответствии со схемой, приведенной на рис. 1, после вычисления в каждой точке изображения частотно-временного спектра

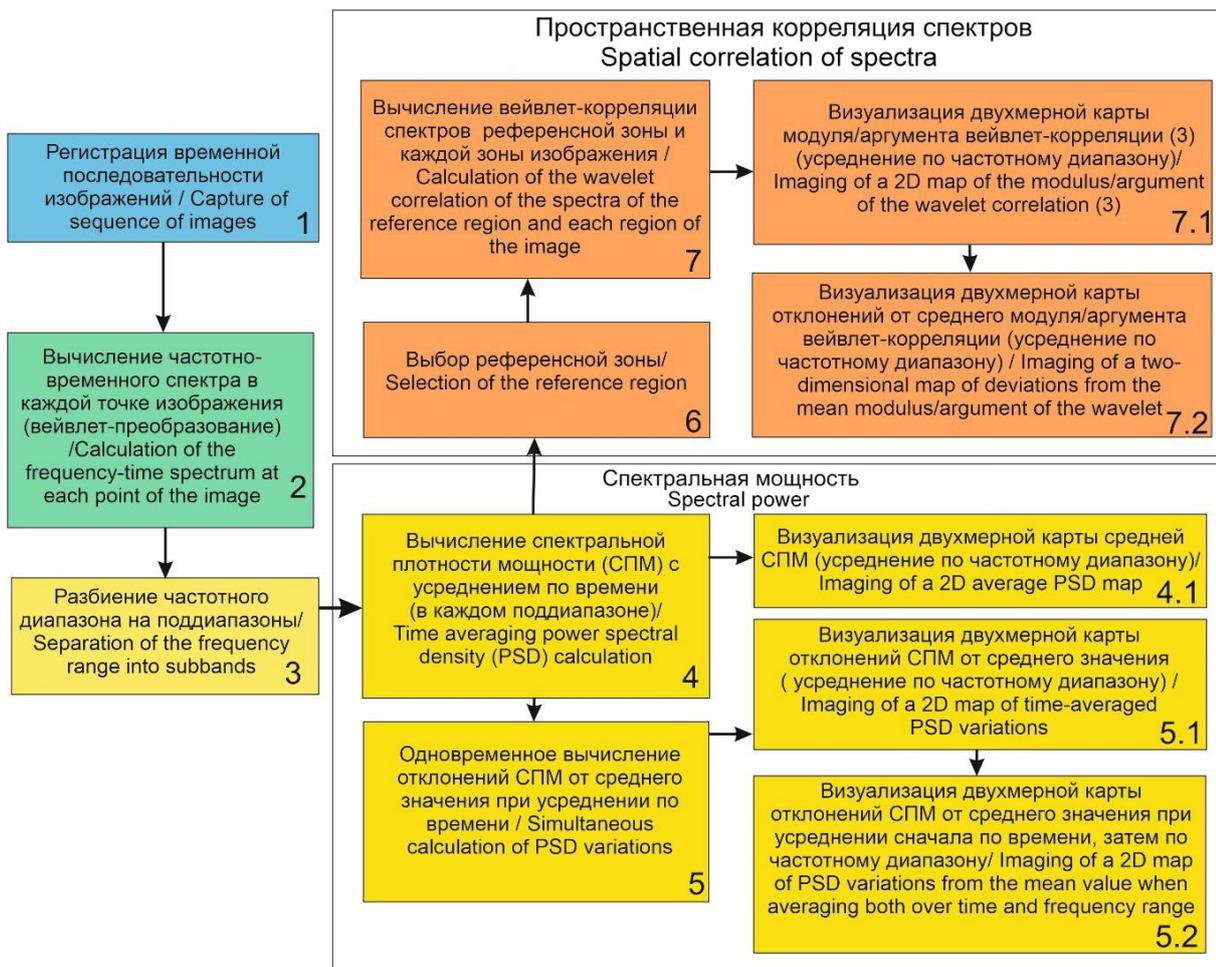


Рис. 1. Блок-схема визуализации пространственной неоднородности спектральных характеристик (цвет онлайн)

Fig. 1. Block diagram of the visualization of the spatial heterogeneity of spectral features (color online)

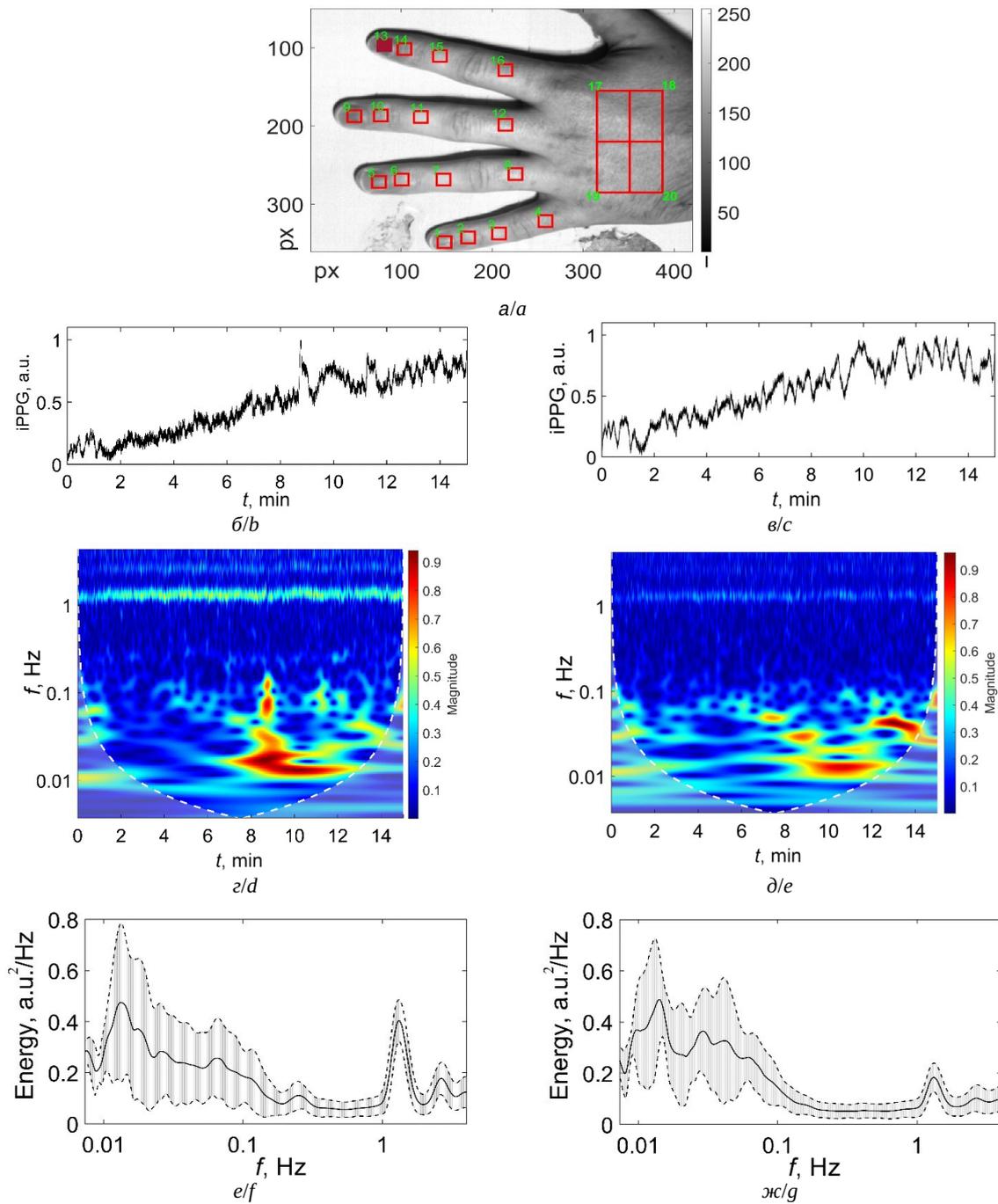


Рис. 2. Вейвлетный анализ в различных зонах объекта при проведении фотоплетизмографической визуализации: *a* – нумерованные зоны анализа на поверхности кисти; *b* – ФПГ-сигнал (iPPG), усредненный в пределах зоны 13; *c* – ФПГ-сигнал, усредненный в пределах зоны 9; *d* – частотно-временной спектр ФПГ-сигнала (вейвлет-спектрограмма) (зона 13, из сигнала предварительно удален линейный тренд); *e* – частотно-временной спектр ФПГ-сигнала (вейвлет-спектрограмма) (зона 9, из сигнала предварительно удален линейный тренд); *f* и *g* – вейвлет-спектры плотности мощности ФПГ-сигнала в зонах 13 и 9 соответственно (сплошная линия), пунктирные линии – среднее квадратичное отклонение мощности при усреднении по времени (цвет онлайн)

Fig. 2. Wavelet analysis of the photoplethysmographic imaging signals in different areas of the object: *a* – numbered regions of interest on the hand surface; *b* – PPG signal (iPPG) averaged within region 13; *c* – PPG signal averaged within region 9; *d* – time-frequency spectrum of the PPG signal (wavelet spectrogram) (region 13, the linear trend was preliminarily removed from the signal); *e* – time-frequency spectrum of the PPG signal (wavelet spectrogram) (region 9, the linear trend was previously removed from the signal); *f* and *g* – wavelet-spectra of power density of the PPG signal in regions 13 and 9, respectively (solid line), dotted lines are the standard deviation of the power density when averaged over time (color online)



он разбивается на поддиапазоны (шаг 3, рис. 1). В частном случае анализа микрогемодинамики это диапазоны эндотелиальной активности (0.005–0.02 Гц), нейрогенной (симпатической адренергической) активности (0.02–0.06 Гц), миогенной (гладкомышечной) активности (0.06–0.16 Гц), дыхательного ритма (0.16–0.5 Гц) и сердечного ритма (пульсовые или кардиальные колебания) (0.5–2 Гц) [28–31].

Затем для каждой точки и в каждом поддиапазоне вычисляется средняя по диапазону спектральная плотность мощности сигнала (шаги 4, 5, рис. 1) с одновременным определением отклонений спектральной плотности мощности от среднего. После этого выполняется визуализация результатов посредством цветового кодирования значений средней мощности каждого поддиапазона (шаг 4.1, рис. 1) и отклонений мощности от среднего при усреднении по времени (шаг 5.1, рис. 1), а также при усреднении как по времени, так и по частоте (шаг 5.2, рис. 1).

Для оценки пространственной неоднородности двумерных данных в приведенной схеме спектр каждой точки (или малой зоны) изображения предлагается сравнивать со спектром опорной (референсной) зоны (шаги 6, 7, рис. 1).

Полученные значения корреляции спектров выбранной точки (зоны) изображения и референсной зоны усредняются в частотном диапазоне и кодируются цветом в диапазоне (0; 1) (шаг 7.1, рис. 1). При необходимости могут быть визуализированы отклонения корреляции спектров от среднего при выполнении усреднения в частотном диапазоне (шаг 7.2, рис. 1).

Поскольку функция корреляции спектров (3) является комплексной, то возможен анализ и цветовое кодирование как её модуля, так и аргумента, характеризующего фазовый сдвиг спектральных компонент на частоте f , а также отклонений аргумента от среднего значения при выполнении усреднения в частотном диапазоне (шаги 7.1, 7.2, рис. 1).

В настоящей работе в качестве референсной зоны была выбрана дистальная фаланга указательного пальца, так как данная зона наиболее часто используется в контактной фотоплетизмографии, реализуемой с помощью пальцевых пульсоксиметров. В качестве других зон интереса определены по 4 зоны на каждом пальце (область ногтя и каждая фаланга пальца) и 4 зоны на тыльной стороне ладони.

2. Результаты

2.1. Пример анализа сигналов

На рис. 2 приведены зоны анализа, сигналы и частотно-временные спектры ФПГ-сигналов, используемые при расчете корреляции в 20 различных зонах объекта. Расчет корреляции спектральных характеристик в различных зонах осуществлялся относительно референсной зоны 13 на дистальной фаланге указательного пальца. На рис. 3 представлена корреляция спектральных компонент в зависимости от частоты при сравнении вейвлет-спектров в зонах 9, 16, 19 с зоной 13.

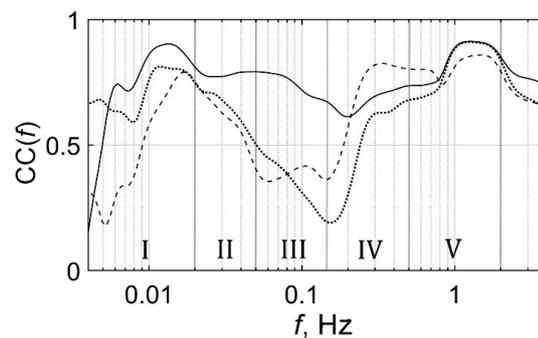


Рис. 3. Вейвлет-корреляция сигналов референсной зоны 13 и зоны 9 (сплошная линия), зон 13 и 16 (пунктирная линия), зон 13 и 19 (точечная линия). Вертикальные линии – границы эндотелиального (I), нейрогенного (II), миогенного (III), дыхательного (IV) и сердечного (V) частотных диапазонов

Fig. 3. Wavelet-correlation of the spectra of reference regions 13 and 9 (solid line), regions 13 and 16 (dashed line), regions 13 and 19 (dotted line). Vertical lines are the boundaries of the endothelial (I), neurogenic (II), myogenic (III), respiratory (IV), and cardiac (V) frequency ranges

2.2. Пространственная корреляция спектральных характеристик

Цветовое картирование корреляции спектров референсной зоны 13 со спектрами в 19 других зонах интереса представлены на рис. 4. Цвет каждой квадратной зоны характеризует значение корреляции (3) в диапазоне (0; 1), усредненное в пределах эндотелиального, нейрогенного, миогенного, дыхательного и сердечного частотных диапазонов (рис. 4, а–д соответственно).

Количественные значения пространственной корреляции спектров представлены на рис. 5, а в зависимости от анатомической зоны (дистальная фаланга (ноготь), дистальная фаланга (кожа), средняя фаланга, проксимальная фаланга, тыльная часть ладони) и на рис. 5, б в зависимости от частотного диапазона.

На основе анализа приведенных данных (рис. 2–5) можно сделать следующие выводы.

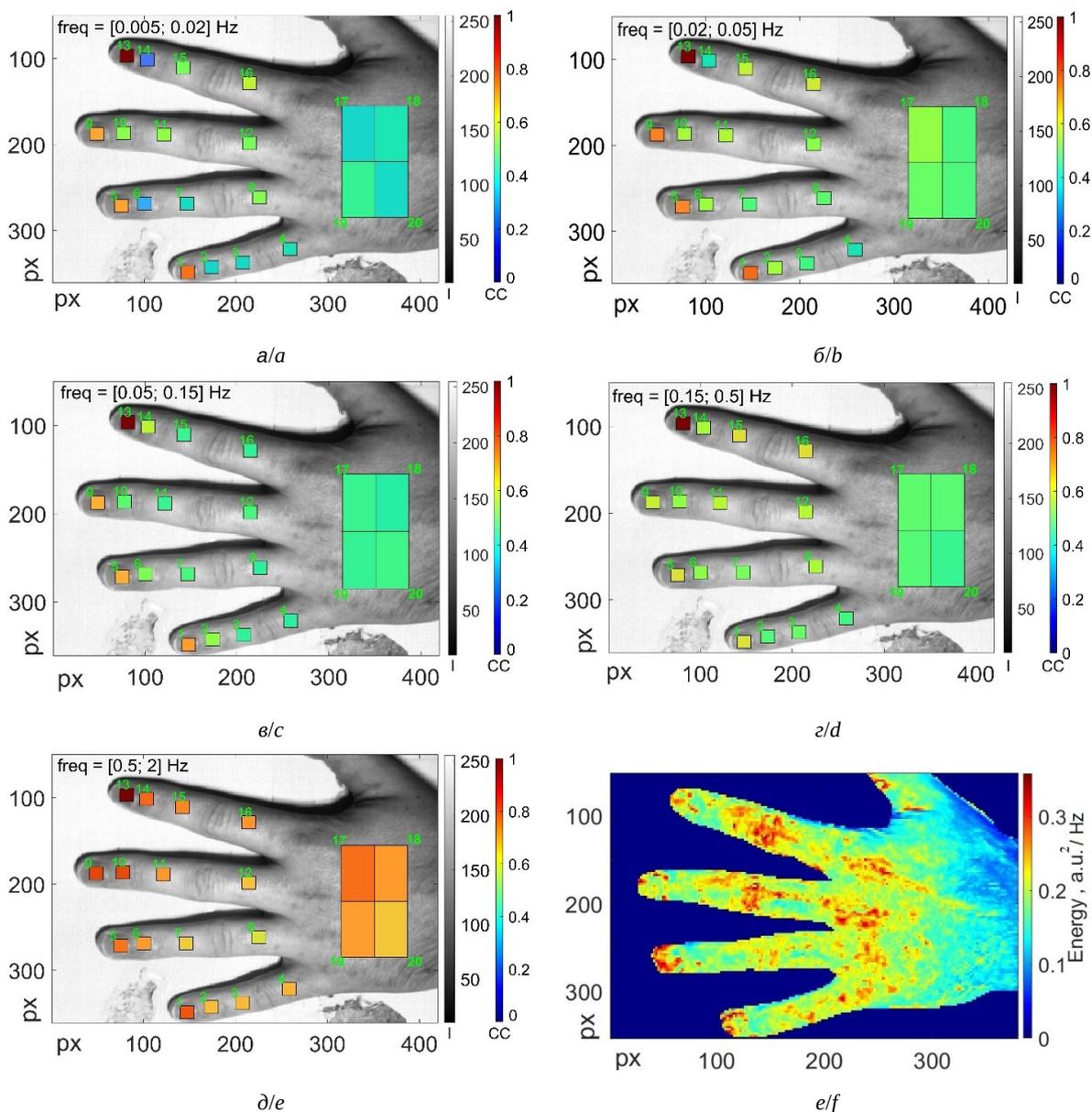


Рис. 4. Визуализация корреляции частотно-временных спектров в различных зонах объекта со спектром референсной зоны 13 для различных частотных диапазонов колебаний микрогемодинамики: а – эндотелиальный, б – нейрогенный, в – миогенный, г – дыхательный, д – сердечный, е – среднее значение спектральной плотности мощности колебаний микрогемодинамики в частотном диапазоне (0.005–2 Гц) (цвет онлайн)

Fig. 4. Visualization of the correlation of time-frequency spectra in different regions of the object with the spectrum of reference region 13 for different frequency ranges of microhemodynamic oscillations: а – endothelial, б – neurogenic, в – myogenic, д – respiratory, е – cardiac, ф – average value of the spectral power density of microhemodynamic oscillations in the frequency range (0.005–2 Hz) (color online)

1. Корреляция спектров ФПГ-сигналов изменяется в широких пределах от 0.3 до 0.8 в зависимости от частотного диапазона и анатомической зоны, т. е. наблюдается существенная пространственная неоднородность частотно-временных спектров (см. рис. 4, 5).

2. На всех фалангах, кроме дистальной (область ногтя), отмечается высокая пространственная корреляция спектров в частотном

диапазоне сердечного ритма (на уровне 0.75) (рис. 4, д) и более низкая корреляция в эндотелиальном, нейрогенном, миогенном и дыхательном диапазонах (на уровне 0.45) (рис. 4, а–г и рис. 5, а).

3. Максимальные значения корреляции ФПГ-сигналов с референсной зоной обнаруживаются на дистальных фалангах, где также регистрируется наименьший разброс относительно сред-

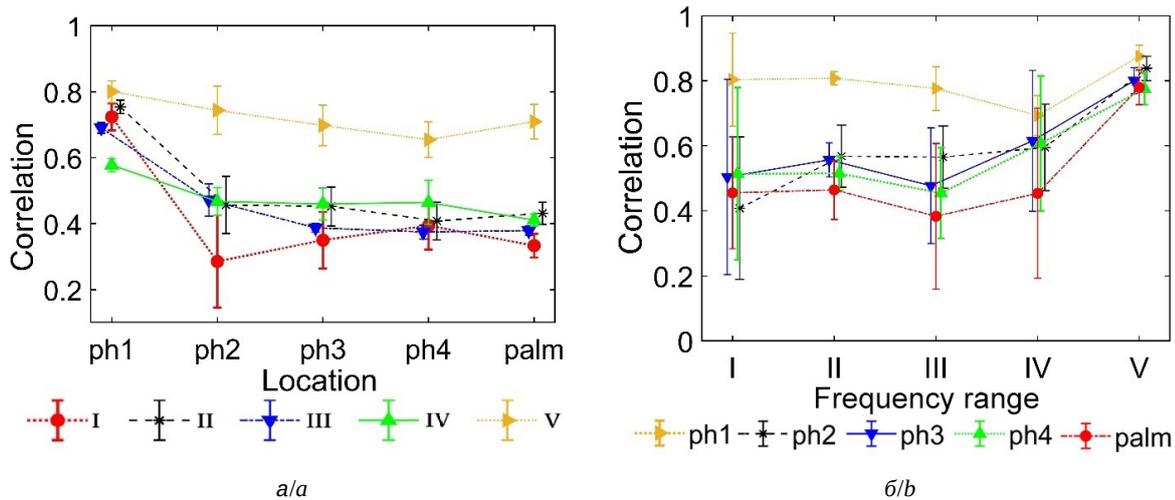


Рис. 5. Средние значения вейвлет-корреляции: а – значения вейвлет-корреляции, усредненной по фалангам всех пальцев в области ногтя (ph1), дистальным фалангам (ph2), средним фалангам (ph3), проксимальным фалангам (ph4) и 4 зонам ладони (palm) (I–V – обозначение анализируемых частотных диапазонов, как на рис. 3); б – значения вейвлет-корреляции различных зон кисти, усредненные в пределах частотных диапазонов колебаний микрогемодинамики (I–V) для зон кисти ph1, ph2, ph3, ph4, palm (цвет онлайн)

Fig. 5 Average values of wavelet-correlation: a – correlation of spectra averaged over the phalanges of all fingers in the nail area (ph1), distal phalanges (ph2), middle phalanges (ph3), proximal phalanges (ph4) and 4 areas of the palm (palm) (I–V – designation of the analyzed frequency ranges coincides with the designation in Fig. 3); б – values of wavelet-correlation of different areas of the hand, averaged within the frequency ranges of microhemodynamic oscillations (I–V) for the areas of the hand ph1, ph2, ph3, ph4, palm (color online)

него значения по фалангам различных пальцев (рис. 5, б).

4. На дистальных фалангах в области ногтя в дыхательном диапазоне колебаний микрогемодинамики обнаруживается минимум корреляции спектров ФПГ-сигналов (рис. 5, б).

5. Для всех анатомических зон кисти кроме дистальной фаланги (область ногтя) характерен рост пространственной корреляции спектров при увеличении частоты, т. е. наименьшая корреляция обнаруживается в эндотелиальном диапазоне, наибольшая – в диапазоне сердечного ритма (рис. 5, б).

6. Значения корреляции при усреднении по анатомической зоне (рис. 5, а) имеют меньшие отклонения от среднего (более однородны), чем при усреднении по диапазону частот (рис. 5, б).

7. Частотная зависимость корреляции (см. рис. 3) демонстрирует, что основные отличия спектральных характеристик с дистальных фаланг от характеристик других зон наблюдаются в миогенном диапазоне и в меньшей степени в нейрогенном и дыхательном диапазонах.

Обсуждение

В большинстве случаев при проведении фотоплетизмографического исследования микрогемодинамики используют зону дистальных фа-

ланг пальцев рук или области лица. Проведенное исследование демонстрирует, что в частотном диапазоне сердечного ритма колебаний кровотока с дистальной фаланги можно использовать для получения представлений о микрогемодинамике в диапазоне сердечного ритма других областей кисти, вследствие сравнительно низкой пространственной неоднородности спектра (рис. 4, д). В более низкочастотных диапазонах (эндотелиальном, нейрогенном, миогенном и дыхательном) частотно-временной спектр сигнала с дистальной фаланги пальца в меньшей степени дает представление о спектре в других областях кисти, вследствие сравнительно высокой пространственной неоднородности спектра (рис. 4, а–г).

Карта мощности спектра в диапазоне 0.005–2 Гц демонстрирует пространственную неоднородность спектра (рис. 4, е). Полученные данные находятся в согласии с результатами исследования усредненных спектров мощности двумерного спекл-контрастного сигнала с поверхности предплечья, в котором также отмечалась пространственная неоднородность [14].

Приведенные на рис. 4, 5 данные о пространственной корреляции спектров дополняют результаты сравнения колебаний сигнала во временной области [16], где регистрировался сигнал



с контактного ФПГ датчика и сопоставлялся с данными ФПГ-визуализации в области стопы. Результаты настоящей работы позволяют сделать предварительные выводы о том, что основной вклад в снижение суммарной пространственной корреляции ФПГ-сигналов вносят низкочастотные составляющие эндотелиального, нейрогенного, миогенного и дыхательного диапазонов.

Как указано на схеме (см. рис. 1, блоки 7.1 и 7.2), кроме модуля функции вейвлет-корреляции можно исследовать её аргумент, имеющий физический смысл разности фаз спектральных составляющих двух ФПГ-сигналов в различных зонах объекта. В настоящей работе такой анализ не проводился, но в исследовании [10] с помощью преобразования Гильберта установлена неоднородность пространственного распределения фаз ФПГ-сигнала (т. е. перфузии) в различных точках лба. Поэтому при проведении анализа фаз ФПГ-данных в области кисти предположительно можно ожидать также пространственную неоднородность фаз спектральных компонент одной и той же частоты. Таким образом, предварительные результаты, полученные в настоящей работе, и их сопоставление с литературными данными позволяют сделать предположение о том, что пространственная неоднородность корреляции спектров колебаний ФПГ-сигнала (см. рис. 5) может быть обусловлена неоднородностью пространственного распределения как мощности (см. рис. 4, е), так и фазы колебаний микрогемодинамики.

Заключение

Таким образом, рассмотрено применение метода цветового картирования корреляции частотно-временных спектров для анализа фотоплетизмографических сигналов. В более общем случае может оцениваться не только корреляция спектров каждой точки объекта с референсной зоной, но и попарно каждой точки с каждой другой точкой. Применение описанного метода к двумерным фотоплетизмографическим данным с тыльной зоны кисти продемонстрировало существенную пространственную неоднородность спектрального состава ФПГ-сигнала. Неоднородность более выражена в низкочастотном диапазоне по сравнению с высокочастотным диапазоном сердечного ритма. В целом отмечается тенденция к уменьшению корреляции спектральных характеристик при удалении от референсной

зоны и при уменьшении анализируемой частоты сигнала. Фотоплетизмографические сигналы, регистрируемые в области дистальной фаланги пальца, репрезентативны преимущественно в отношении сердечных колебаний микрогемодинамики других зон кисти и в значительно меньшей степени в отношении эндотелиальных, нейрогенных, миогенных и дыхательных колебаний. Следовательно, для получения адекватных результатов спектрального анализа компонент микрогемодинамики (в особенности в низкочастотном диапазоне менее 0.5 Гц) можно рекомендовать проведение контактных фотоплетизмографических измерений либо в нескольких опорных точках поверхности объекта, либо использование метода двумерной ФПГ-визуализации. Для верификации приведенных в данной работе результатов необходимо провести дополнительную количественную и статистическую оценку корреляций на большей выборке. Помимо метода ФПГ-визуализации предложенная методика оценки пространственно-временной неоднородности двумерных сигналов имеет перспективу применения прежде всего в области анализа микрогемодинамики методами лазерной доплеровской, лазерной спекл-контрастной, термографической и гиперспектральной визуализации.

Список литературы

1. Allen J., Howell K. Microvascular imaging: Techniques and opportunities for clinical physiological measurements // *Physiological Measurement*. 2014. Vol. 35, № 7. P. R91–R141. <https://doi.org/10.1088/0967-3334/35/7/R91>
2. Dremine V. V., Zherebtsov E. A., Popov A. P., Meglinski I. V., Bykov A. V. Hyperspectral imaging of diabetes mellitus skin complications // *Biomedical Photonics for Diabetes Research*. CRC Press, 2022. P. 177–195.
3. Zherebtsov E., Dremine V., Popov A., Doronin A., Kurakina D., Kirillin M., Bykov A. Hyperspectral imaging of human skin aided by artificial neural networks // *Biomedical Optics Express*. 2019. Vol. 10, № 7. P. 3545–3559. <https://doi.org/10.1364/BOE.10.003545>
4. Sagaidachnyi A., Mayskov D., Fomin A., Zaletov I., Skripal A. Separate extraction of human eccrine sweat gland activity and peripheral hemodynamics from high- and low-quality thermal imaging data // *Journal of Thermal Biology*. 2022. Vol. 110. Article number 103351. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2022.103351>
5. Майсков Д. И., Сагайдачный А. А., Залетов И. С., Фомин А. В., Скрипаль А. В. Интегральное картирование активности потовых желез методом дифференциальной термографии // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика*. 2021. Т. 21, вып. 3.



- C. 222–232. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-3-222-232>
6. Сагайдачный А. А., Майсков Д. И., Залетов И. С., Фомин А. В., Скрипаль Ан. В. Детектирование активности единичных потовых желез методом макротермографии и ее взаимосвязь с температурой кожи и периферической гемодинамикой // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2020. Т. 20, вып. 2. С. 103–115. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-2-103-115>
 7. Cardone D., Pinti P., Merla A. Thermal infrared imaging-based computational psychophysiology for psychometrics // Computational and Mathematical Methods in Medicine. 2015. Vol. 2015. Article number 984353. <https://doi.org/10.1155/2015/984353>
 8. Taratorin A. M., Godik E. E., Guljaev Y. V. Functional mapping of dynamic biomedical images // Measurement. 1990. Vol. 8, № 3. P. 137–140. [https://doi.org/10.1016/0263-2241\(90\)90055-B](https://doi.org/10.1016/0263-2241(90)90055-B)
 9. Фрик П. Г., Соколов Д. Д., Степанов Р. А. Вейвлет-анализ пространственно-временной структуры физических полей // Успехи физических наук. 2022. Т. 192, № 1. С. 69–99. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.10.038859>
 10. Borik S., Lyra S., Perlitz V., Keller M., Leonhardt S., Blazek V. On the spatial phase distribution of cutaneous low-frequency perfusion oscillations // Scientific Reports. 2022. Vol. 12, № 1. P. 1–18. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-09762-0>
 11. Tikhonova I. V., Grinevich A. A., Tankanag A. V. Analysis of phase interactions between heart rate variability, respiration and peripheral microhemodynamics oscillations of upper and lower extremities in human // Biomedical Signal Processing and Control. 2022. Vol. 71. P. 103091. <https://doi.org/10.1016/j.bspc.2021.103091>
 12. Mizeva I., Potapova E., Dremine V., Kozlov I., Dunaev A. Spatial heterogeneity of cutaneous blood flow respiratory-related oscillations quantified via laser speckle contrast imaging. PLoS ONE. 2021. Vol. 16, № 5. Article number e0252296. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0252296>
 13. Mizeva I., Dremine V., Potapova E., Zherebtsov E., Kozlov I., Dunaev A. Wavelet analysis of the temporal dynamics of the laser speckle contrast in human skin. IEEE Transactions on Biomedical Engineering. 2019. Vol 67, № 7. P. 1882–1889. <https://doi.org/10.1109/TBME.2019.2950323>
 14. Hultman M., Larsson M., Strömberg T., Henricson J., Iredahl F., Fredriksson I. Flowmotion imaging analysis of spatiotemporal variations in skin microcirculatory perfusion // Microvascular Research. 2022. Vol. 146. Article number 104456. <https://doi.org/10.1016/j.mvr.2022.104456>
 15. Волков И. Ю., Сагайдачный А. А., Фомин А. В. Фотоплетизмографическая визуализация гемодинамики и двухмерная оксиметрия // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2022. Т. 22, вып. 1. С. 15–45. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-1-15-45>
 16. Procka P., Celovska D., Smondrk M., Borik S. Correlation Mapping of Perfusion Patterns in Cutaneous Tissue // Applied Sciences. 2022. Vol. 12, № 15. Article number 7658. <https://doi.org/10.3390/app12157658>
 17. Кубланов В. С., Пуртов К. С. Дистанционная фотоплетизмография в задаче исследования variability сердечного ритма // Биомедицинская радиоэлектроника. 2015. № 8. С. 3–9.
 18. Кульминский Д. Д., Курбако А. В., Сказкина В. В., Прохоров М. Д., Пономаренко В. И., Киселев А. Р., Безручко Б. П., Караваев А. С. Разработка цифрового датчика пальцевой фотоплетизмограммы // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2021. Т. 21, вып. 1. С. 58–68. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-1-58-68>
 19. Симонян М. А., Сказкина В. В., Посненкова О. М., Ишбулатов Ю. М., Шварц В. А., Боровкова Е. И., Киселев А. Р. Анализ спектральных показателей сигнала фотоплетизмограммы и их динамики в зависимости от возраста пациента для задач скрининга сердечно-сосудистых заболеваний // Профилактическая медицина. 2021. Т. 24, № 8. С. 73–79. <https://doi.org/10.17116/profmed20212408173>
 20. Karavaev A. S., Borovik A. S., Borovkova E. I., Orlova E. A., Simonyan M. A., Ponomarenko V. I., Kiselev A. R. Low-frequency component of photoplethysmogram reflects the autonomic control of blood pressure // Biophysical Journal. 2021. Vol. 120, № 13. P. 2657–2664. <https://doi.org/10.1016/j.bpj.2021.05.020>
 21. Kiselev A. R., Borovkova E. I., Shvartz V. A., Skazkina V. V., Karavaev A. S., Prokhorov M. D., Bockeria O. L. Low-frequency variability in photoplethysmographic waveform and heart rate during on-pump cardiac surgery with or without cardioplegia // Scientific Reports. 2020. Vol. 10, № 1. P. 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-58196-z>
 22. Tankanag A. V., Grinevich A. A., Tikhonova I. V., Chemeris N. K. An analysis of phase relationships between oscillatory processes in the human cardiovascular system // Biophysics. 2020. Vol. 65, № 1. P. 159–164. <https://doi.org/10.1134/s0006350920010194>
 23. Tankanag A., Krasnikov G., Mizeva I. A pilot study: Wavelet cross-correlation of cardiovascular oscillations under controlled respiration in humans // Microvascular Research. 2020. Vol. 130. Article number 103993. <https://doi.org/10.1016/j.mvr.2020.103993>
 24. Tankanag A. V., Krasnikov G. V., Chemeris N. K. Phase Coherence of Finger Skin Blood Flow Oscillations Induced by Controlled Breathing in Humans // Physics of Biological Oscillators: New Insights into Non-Equilibrium and Non-Autonomous Systems / Aneta Stefanovska, Peter V. E. McClintock. Cham, Switzerland, Springer, 2021. P. 281–289. https://doi.org/10.1007/978-3-030-59805-1_18
 25. Короновский А. А., Храмов А. Е. Непрерывный вейвлетный анализ и его приложения. М. : Физматлит, 2003. 176 с.
 26. Nesme-Ribes E., Frick P., Sokoloff D., Zakharov V., Ribes J. C., Vigouroux A., Laclare F. Wavelet analysis of Maunder minimum as recorded in Solar diameter data // Comptes Rendus de Academie des Sciences, Paris, Serie II. 1995. Vol. 321, № 2 B. P. 525–532.



27. Мизева И. А., Степанов Р. А., Фрик П. Г. Вейвлетные кросскорреляции двумерных полей // Вычислительные методы и программирование. 2006. Т. 7, № 2. С. 172–179.
28. Федорович А. А. Функциональное состояние регуляторных механизмов микроциркуляторного кровотока в норме и при артериальной гипертензии по данным лазерной доплеровской флоуметрии // Регионарное кровообращение и микроциркуляция. 2010. Т. 9, № 1. С. 49–60.
29. Крупаткин А. И. Пульсовые и дыхательные осцилляции кровотока в микроциркуляторном русле кожи человека // Физиология человека. 2008. Т. 34, № 3. С. 70–76.
30. Kvandal P., Landsverk S. A., Bernjak A., Stefanovska A., Kvernmo H. D., Kirkeboen K. A. Low-frequency oscillations of the laser Doppler perfusion signal in human skin // *Microvascular Research*. 2006. Vol. 72, № 3. P. 120–127. <https://doi.org/10.1016/j.mvr.2006.05.006>
31. Bernjak A., Stefanovska A., McClintock P. V., Owen-Lynch P. J., Clarkson P. B. Coherence between fluctuations in blood flow and oxygen saturation // *Fluctuation and Noise Letters*. 2012. Vol. 11, № 1. Article number 1240013. <https://doi.org/10.1142/S0219477512400135>
1. Allen J., Howell K. Microvascular imaging: Techniques and opportunities for clinical physiological measurements. *Physiological Measurement*, 2014, vol. 35, iss. 7, pp. R91–R141. <https://doi.org/10.1088/0967-3334/35/7/R91>
2. Dremine V. V., Zherebtsov E. A., Popov A. P., Meglinski I. V., Bykov A. V. Hyperspectral imaging of diabetes mellitus skin complications. In: *Biomedical Photonics for Diabetes Research*. CRC Press, 2022, pp. 177–195.
3. Zherebtsov E., Dremine V., Popov A., Doronin A., Kurakina D., Kirillin M., Bykov A. Hyperspectral imaging of human skin aided by artificial neural networks. *Biomedical Optics Express*, 2019, vol. 10, iss. 7, pp. 3545–3559. <https://doi.org/10.1364/BOE.10.003545>
4. Sagaidachnyi A., Mayskov D., Fomin A., Zaletov I., Skripal A. Separate extraction of human eccrine sweat gland activity and peripheral hemodynamics from high-and low-quality thermal imaging data. *Journal of Thermal Biology*, 2022, vol. 110, article no. 103351. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2022.103351>
5. Mayskov D. I., Sagaidachnyi A. A., Zaletov I. S., Fomin A. V., Skripal An. V. Integral mapping of the sweat-gland activity using differential thermography technique. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2021, vol. 21, iss. 3, pp. 222–232 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-3-222-232>
6. Sagaidachnyi A. A., Mayskov D. I., Zaletov I. S., Fomin A. V., Skripal An. V. Detection of the Single Sweat Glands Activity Via the Macro Thermography Techniques and Its Relation with Skin Temperature and Peripheral Hemodynamics. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2020, vol. 20, iss. 2, pp. 103–115 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-2-103-115>
7. Cardone D., Pinti P., Merla A. Thermal infrared imaging-based computational psychophysiology for psychometrics. *Computational and Mathematical Methods in Medicine*, 2015, vol. 2015, article no. 984353. <https://doi.org/10.1155/2015/984353>
8. Taratorin A. M., Godik E. E., Guljaev Y. V. Functional mapping of dynamic biomedical images. *Measurement*, 1990, vol. 8, no. 3, pp. 137–140. [https://doi.org/10.1016/0263-2241\(90\)90055-B](https://doi.org/10.1016/0263-2241(90)90055-B)
9. Frick P. G., Sokoloff D. D., Stepanov R. A. Wavelets for the space-time structure analysis of physical fields. *Phys. Usp.*, 2022, vol. 65, pp. 62–89. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.10.038859>
10. Borik S., Lyra S., Perlitz V., Keller M., Leonhardt S., Blazek V. On the spatial phase distribution of cutaneous low-frequency perfusion oscillations. *Scientific Reports*, 2022, vol. 12, no. 1, pp. 1–18. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-09762-0>
11. Tikhonova I. V., Grinevich A. A., Tankanag A. V. Analysis of phase interactions between heart rate variability, respiration and peripheral microhemodynamics oscillations of upper and lower extremities in human. *Biomedical Signal Processing and Control*, 2022, vol. 71, pp. 103091. <https://doi.org/10.1016/j.bspc.2021.103091>
12. Mizeva I., Potapova E., Dremine V., Kozlov I., Dunaev A. Spatial heterogeneity of cutaneous blood flow respiratory-related oscillations quantified via laser speckle contrast imaging. *PLoS ONE*, 2021, vol. 16, no. 5, article no. e0252296. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0252296>
13. Mizeva I., Dremine V., Potapova E., Zherebtsov E., Kozlov I., Dunaev A. Wavelet analysis of the temporal dynamics of the laser speckle contrast in human skin. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 2019. vol. 67, no. 7, pp. 1882–1889. <https://doi.org/10.1109/TBME.2019.2950323>
14. Hultman M., Larsson M., Strömberg T., Henricson J., Iredahl F., Fredriksson I. Flowmotion imaging analysis of spatiotemporal variations in skin microcirculatory perfusion. *Microvascular Research*, 2022, vol. 146, article no. 104456. <https://doi.org/10.1016/j.mvr.2022.104456>
15. Volkov I. Yu., Sagaidachnyi A. A., Fomin A. V. Photoplethysmographic imaging of hemodynamics and two-dimensional oximetry. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2022, vol. 22, iss. 1, pp. 15–45 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-1-15-45>
16. Procka P., Celovska D., Smondrc M., Borik S. Correlation Mapping of Perfusion Patterns in Cutaneous Tissue. *Applied Sciences*, 2022, vol. 12, iss. 15, article no. 7658. <https://doi.org/10.3390/app12157658>
17. Kublanov V.S., Purtov K.S. Heart rate variability study by remote photoplethysmography. *Biomeditsinskaja radioelektronika* [Biomedical Radio Electronics], 2015, no. 8, pp. 3–9 (in Russian).
18. Kulminskiy D. D., Kurbako A.V., Skazkina V.V., Prokhorov M. D., Ponomarenko V. I., Kiselev A. R., Bezruchko B. P., Karavaev A. S. Development of a digital finger photoplethysmogram sensor. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2021, vol. 21, iss. 1, pp. 58–68 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-1-58-68>



19. Simonyan M. A., Skazkina V. V., Posnenkova O. M., Ishbulatov Yu. M., Shvartz V. A., Borovkova E. I., Gorshkov A. Yu., Fedorovich A. A., Dzhioeva O. N., Karavaev A. S., Gridnev V. I., Drapkina O. M., Kiselev A. R. Analysis of the spectral indices of the photoplethysmographic signals and their age-related dynamics for the task of screening of cardiovascular diseases. *The Russian Journal of Preventive Medicine*, 2021, vol. 24, no. 8, pp. 73–79 (in Russian). <https://doi.org/10.17116/profmed20212408173>
20. Karavaev A. S., Borovik A. S., Borovkova E. I., Orlova E. A., Simonyan M. A., Ponomarenko V. I., Kiselev A. R. Low-frequency component of photoplethysmogram reflects the autonomic control of blood pressure. *Biophysical Journal*, 2021, vol. 120, no. 13, pp. 2657–2664. <https://doi.org/10.1016/j.bpj.2021.05.020>
21. Kiselev A. R., Borovkova E. I., Shvartz V. A., Skazkina V. V., Karavaev A. S., Prokhorov M. D., Bockeria O. L. Low-frequency variability in photoplethysmographic waveform and heart rate during on-pump cardiac surgery with or without cardioplegia. *Scientific Reports*, 2020, vol. 10, no. 1, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-58196-z>
22. Tankanag A. V., Grinevich A. A., Tikhonova I. V., Chemeris N. K. An analysis of phase relationships between oscillatory processes in the human cardiovascular system. *Biophysics*, 2020, vol. 65, no. 1, pp. 159–164. <https://doi.org/10.1134/s0006350920010194>
23. Tankanag A., Krasnikov G., Mizeva I. A pilot study: Wavelet cross-correlation of cardiovascular oscillations under controlled respiration in humans. *Microvascular Research*, 2020, vol. 130, article no. 103993. <https://doi.org/10.1016/j.mvr.2020.103993>
24. Tankanag A. V., Krasnikov G. V., Chemeris N. K. Phase Coherence of Finger Skin Blood Flow Oscillations Induced by Controlled Breathing in Humans. In: Aneta Stefanovska, Peter V. E. McClintock, eds. *Physics of Biological Oscillators: New Insights into Non-Equilibrium and Non-Autonomous Systems*. Springer, Cham, Switzerland, 2021, pp. 281–289. https://doi.org/10.1007/978-3-030-59805-1_18
25. Koronovskii A. A., Hramov A. E. *Nepreryvnyi veivletnyi analiz i ego prilozheniia* [Continuous wavelet analysis and its applications]. Moscow, Fizmatlit, 2003. 176 p. (in Russian).
26. Nesme-Ribes E., Frick P., Sokoloff D., Zakharov V., Ribes J. C., Vigouroux A., Laclare F. Wavelet analysis of Maunder minimum as recorded in Solar diameter data. *Comptes Rendus de Academie des Sciences, Paris, Serie II*, 1995, vol. 321, no. 2 B, pp. 525–532.
27. Mizeva I. A., Stepanov R. A., Frik P. G. Veivletnye krosskorreliatsii dvumernykh polei [Wavelet cross-correlations of two-dimensional fields]. *Num. Meth. Prog.*, 2006, vol. 7, no. 2, pp. 172–179 (in Russian).
28. Fedorovich A. A. Functional state of regulatory mechanisms of microcirculatory blood flow in normal and arterial hypertension according to laser Doppler flowmetry. *Regional Blood Circulation and Microcirculation*, 2010, vol. 9, no. 1, pp. 49–60 (in Russian).
29. Krupatkin A. I. Pulse and respiratory oscillations of blood flow in the microvasculature of the human skin. *Human Physiology*, 2008, vol. 34, no. 3, pp. 70–76 (in Russian).
30. Kvandal P., Landsverk S. A., Bernjak A., Stefanovska A., Kvermmo H. D., Kirkebøen K. A. Low-frequency oscillations of the laser Doppler perfusion signal in human skin. *Microvascular Research*, 2006, vol. 72, no. 3, pp. 120–127. <https://doi.org/10.1016/j.mvr.2006.05.006>
31. Bernjak A., Stefanovska A., McClintock P. V., Owen-Lynch P. J., Clarkson P. B. Coherence between fluctuations in blood flow and oxygen saturation. *Fluctuation and Noise Letters*, 2012, vol. 11, no. 1, article no. 1240013. <https://doi.org/10.1142/S0219477512400135>

Поступила в редакцию 06.12.2022; одобрена после рецензирования 17.03.2023; принята к публикации 20.03.2023
The article was submitted 06.12.2022; approved after reviewing 17.03.2023; accepted for publication 20.03.2023



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 141–149
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 141–149
<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-141-149>, EDN: IWWZMM

Article

Competitive bidirectional pathways of vascular tone regulation via arachidonic acid metabolites



D. V. Verveiko¹✉, A. Yu. Verisokin², S. V. Lagosha¹, A. R. Brazhe²

¹Kursk State University, 33 Radishcheva St., Kursk 35000, Russia

²Lomonosov Moscow State University, GSP-1 Leninskie Gory, Moscow 119991, Russia

Darya V. Verveiko, allegroform@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3661-3928>

Andrey Yu. Verisokin, ffalconn@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3655-7682>

Stanislav V. Lagosha, superstas-s@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6568-8983>

Alexey R. Brazhe, brazhe@biophys.msu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1495-4652>

Abstract. Background and Objectives: The processes taking place in each element of a neurogliovascular unit will have repercussions in the entire unit. Astrocytes produce arachidonic acid, and its metabolites play a key role in neurogliovascular dynamics with a possibility for bidirectional control, specifically *EETs* and *PGE₂* have a vasodilatory effect while *20-HETE* acts as a vasoconstrictor. We develop a minimalistic model of model of neurogliovascular unit which takes into account the effect of arachidonic acid metabolites on the blood vessel radius, determining the blood flow and further activity of the elements. **Materials and Methods:** In order to test the model, we simulate two scenarios of model behavior, including an external influence leading to an increase in neuronal potassium, and an external influence on *EETs*. **Results:** We have proposed a mathematical model of the neurogliovascular unit, which accounts for *IP₃*-dependent calcium dynamics in the astrocyte, neuronal activity, and vascular dynamics, and relies on arachidonic acid and its metabolites as vasoactive substances. Numerical simulations have demonstrated the plausibility of such a control loop involving the elements of the neurogliovascular unit and associated with the influence of arachidonic acid metabolites on vascular tone and indirectly on synaptic activity. We conclude that the model can be used for further theoretical studies of the regulatory mechanisms pertaining to cerebral perfusion.

Keywords: astrocyte, arachidonic acid, synaptic activity, neurogliovascular unit

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-74-00146).

For citation: Verveiko D. V., Verisokin A. Yu., Lagosha S. V., Brazhe A. R. Competitive bidirectional pathways of vascular tone regulation via arachidonic acid metabolites. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 141–149. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-141-149>, EDN: IWWZMM

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC0-BY 4.0)

Научная статья

УДК 577.35

Конкурентные двунаправленные пути регуляции тонуса сосудов воздействием метаболитов арахидоновой кислоты

Д. В. Вerveiko¹✉, А. Ю. Верисокин¹, С. В. Лагоша², А. Р. Браже²

¹Курский государственный университет, Россия, 305000, г. Курск, ул. Радищева, д. 33

²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Россия, 119234, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1

Вerveико Дарья Вячеславовна, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник НИЦ физики конденсированного состояния, allegroform@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3661-3928>

Верисокин Андрей Юрьевич, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник НИЦ физики конденсированного состояния, ffalconn@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3655-7682>

Лагоша Станислав Витальевич, младший научный сотрудник кафедры биофизики, superstas-s@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6568-8983>

Браже Алексей Рудольфович, кандидат биологических наук, старший научный сотрудник кафедры биофизики, brazhe@biophys.msu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1495-4652>

Аннотация. Предпосылки и цели: Процессы, происходящие в каждом элементе нейроглиоваскулярной единицы, будут иметь последствия для всей структурной единицы. Астроциты продуцируют арахидоновую кислоту, и её метаболиты играют ключевую роль в нейроглиоваскулярной динамике благодаря возможности двунаправленного контроля, в частности *EETs* и *PGE₂* оказывают сосудорасширяющее действие, а *20-HETE* действует как вазоконстриктор. Для учёта влияния метаболитов арахидоновой кислоты на радиус кровеносных сосудов разработана минималистическая модель нейроглиоваскулярной единицы, определяющая кровоток и активность элементов. **Материалы и методы:** Для проверки модели используются два сценария ее поведения, включая внешнее воздействие, приводя-



щее к увеличению нейронального калия, и внешнее воздействие на *EETs*. **Результаты:** Предложена новая математическая модель нейроглиоваскулярной единицы, включающая в себя уравнения, описывающие IP_3 -зависимую кальциевую динамику в астроците, нейронную активность, васкулярную динамику с учётом синтеза арахидоновой кислоты и её производных. Проведена численная проверка работоспособности модели, показавшая, что она успешно воспроизводит известные пути регуляции активности элементов нейроглиоваскулярной единицы, связанные с влиянием метаболитов арахидоновой кислоты на тонус сосудов и опосредованно на синаптическую активность. Модель может быть использована для дальнейших теоретических исследований функционирования нервной ткани головного мозга и, в частности, механизмов перфузии.

Ключевые слова: астроциты, арахидоновая кислота, синаптическая активность, нейроглиоваскулярная единица

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-74-00146).

Для цитирования: Вервейко Д. В., Верисокин А. Ю., Лагоша С. В., Браже А. Р. Конкурентные двунаправленные пути регуляции тонуса сосудов воздействием метаболитов арахидоновой кислоты // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 141–149. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-141-149>, EDN: IWWZMM

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Introduction

Depolarization waves in the cerebral cortex are accompanied by a large number of ion flows: in addition to the release of potassium ions by neurons into the intercellular space and the inwards current of sodium ions, excess potassium ions in extracellular medium are absorbed by astrocytes and blood vessels, in large amounts [1]. Thus, both neurons and astrocytes are important in maintaining the homeostasis of the cerebral cortex tissue.

The neuronal pathway for increasing the activity of the nervous tissue leads to the rapid formation of nitric oxide (*NO*) in neurons by the *NO* synthase. It causes dilation of blood vessels, which facilitates the increase in oxygen supply, thus allowing for sustained activity. The astrocytic pathway is associated with changes in the level of calcium in astrocytes, leading to the synthesis of arachidonic acid (*AA*) derivatives that promote dilation (*EETs*, PGE_2) or constriction (*20-HETE*) of blood vessels [2]. The net direction of the vasomotor effect linked to cortical spreading depolarization (*CSD*) wave is determined by oxygen concentration in brain tissue, while the astrocytic role in this process depends on its own metabolic and activation state, which in turn can be noticed by subcellular changes in calcium concentration, but the precise mechanism remains unclear [3].

The synthesis of *AA* derivatives on its own is also determined by the oxygen concentration in nervous tissue. Under hyperoxic conditions, an increase in the level of calcium in astrocytes leads to the release of vasoactive metabolites of *AA* from their endfeet into blood vessels and subsequent vasoconstriction; normoxic and hypoxic conditions are accompanied by vasodilation [4]. An increase in glial calcium and subsequent formation of *AA* derivatives also affects the activity of neighboring synapses [5].

Astrocytes are activated and play a protective role after ischemic stress caused by the propagation

of *CSD* wave [6]. This, together with high plasticity, makes these cells a suitable object for modulation of neuron activity during pathological processes by regulating astrocytic calcium dynamics, which under certain conditions, allows neurons to return to normal functioning.

Recently, a number of models have been proposed that describe neuronal activity, calcium waves in astrocytes, the interaction of neurons and astrocytes, and neurovascular coupling with varying degrees of detail (see, for example, reviews [7–9]).

There is a clear tendency to combine all three components into an integrated complex construction, which started with the introduction of the concept of a neurovascular unit (*NVU*), which includes the neuron, the astrocyte, the intercellular space surrounding them, and the nearby blood vessel. The concept of *NVU* took a long time to firmly establish itself in the scientific community and was more or less directly referred to in many papers. Though, interactions in distinct parts of *NVU* are mentioned much earlier, for example, in the research of neuronal activity modulation and arterioles dilatation propagation in the cerebellum cortex [10]. The final concept of *NVU* was formulated as the result of the Progress Review Group meeting of the National Institute of Neurological Disorders and Stroke of the NIH [11]. Further neuronal dynamic studies in the brain revealed the necessity to also include the dynamics of glial cells-astrocytes into the model (for example, [12]). Some of the models of interaction of its elements are given in the theoretical review [8]. Most of them do not consider the role of *AA* metabolites synthesized in astrocytes in regulatory processes, being limited exclusively to modeling calcium waves in astrocytes and neuronal activity. Models that do consider the effect of *AA* derivatives are limited to including only individual metabolites, without giving a full picture of the interactions.



For example, the model of the neurogliovascular unit (NGVU) (combination of a neuron, astrocyte and blood vessel), considered in [13], reproduces the dynamics of potassium and *NO* in neurons, the glutamate-determined calcium dynamics in astrocytes, as well as *EETs*-mediated signaling to blood vessels, but does not take into account other key *AA* metabolites, that affect blood flow (*20-HETE*, *PGE₂*). The model [14] also considers exclusively the effect of *EETs* and does not take into account the mechanism associated with nitric oxide, due to the lack of experimental results on its effect at that time. Another main mediator between neuronal activity and vascular dynamics is *PGE₂* introduced in the NGVU model presented in [15]. In contrast to previous models, *EETs* are not taken into account here. In addition, all these models neglect the role of oxygen supply to the nervous tissue, as such, they do not take into account the different scenarios of the behavior of the entire system during hypoxia and hyperoxia.

At the same time, experimental data [16] indicate the key role of *AA* derivatives and *NO* in the control of blood flow and neuronal activity, including critical situations accompanied by hypoxia or hyperoxia. This means that understanding of such processes is impossible without creating a new complex mathematical model that covers all processes of synthesis of *AA* metabolites and *NO* and their functional interactions.

Another limitation of the existing modeling studies of neuronal dynamics and CSD wave is their emphasis on the leading edge, while the trailing edge is the crucial point for external control of the synaptic activity, which determines the degree of neurological deficit and the return speed of the nervous tissue to the normal state. For practical application, a complex NGVU model, which is both quite realistic from a biophysical point of view and simple in terms of computation, is a good starting point for developing methods for controlling blood flow and brain activity during pathological processes.

In this work we develop a mathematical model of NGVU components, described by dynamic equations for neuronal activity, astrocytic calcium dynamics and vascular activity, with *AA* metabolites as additional variables. To discuss the obtained numerical results we use known experimental findings associated with *AA* metabolites.

Model

For a theoretical study of the effect of *AA* and its derivatives on the functioning of the nervous tissue, we propose a simple local mathematical model of NGVU. Based on the experimental data, we show the main regulatory dependencies associated with the elements of NGVU as the functional diagram, which is presented in Fig. 1.

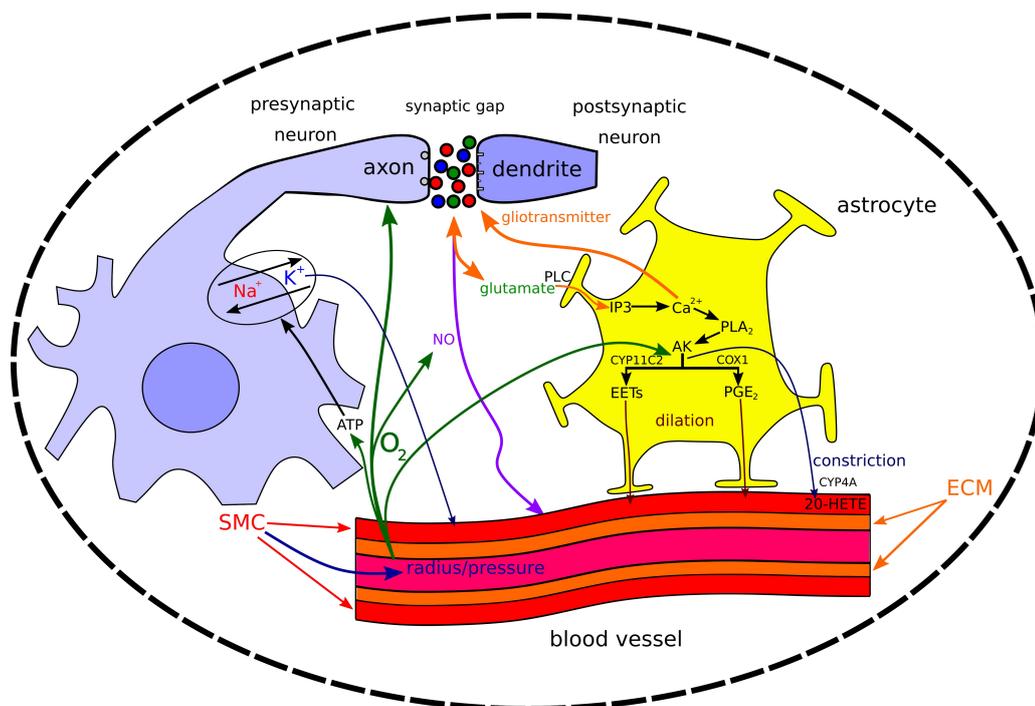


Fig. 1. Model of a neurovascular unit (color online)



Astrocyte

To model calcium dynamics in an astrocyte, we use the IP_3 -dependent calcium dynamics Ullah model [17], which was extended by including the surface-to-volume ratio (SVR) parameter, which allows to take into account the morphological features of the astrocyte cell [18]. The model includes the following variables: concentrations of cytoplasmic calcium $[Ca^{2+}]_c$, endoplasmic reticulum calcium $[Ca^{2+}]_{ER}$, inositol triphosphate $[IP_3]$, and gate variable h for the variable $[IP_3]$:

$$\frac{d[Ca^{2+}]_c}{dt} = (1 - SVR)J_{ER} + SVR(J_{in} - J_{out}); \quad (1)$$

$$\frac{d[IP_3]}{dt} = SVR(J_{\delta} + J_{Glu}) - \frac{[IP_3] - [IP_3]_0}{\tau_r}; \quad (2)$$

$$\frac{d[Ca^{2+}]_{ER}}{dt} = (1 - SVR)J_{ER}; \quad (3)$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{h_{\infty} - h}{\tau_h}. \quad (4)$$

A detailed description of the currents included in the equations can be found in the original works [17, 18]. Here we emphasize that the connection of the astrocyte with neurons in the model is described by current J_{Glu} accounting for the effect of glutamate on the production of IP_3 : $J_{Glu} = v_{Glu}MM([Glu]^{0.3}, k_{Glu}^{0.3})$. Here and below, to describe the Michaelis–Menten dynamics, we introduce the function

$$MM(x, y) = x(x + y)^{-1}. \quad (5)$$

We add the equation for arachidonic acid $[AA]$ production:

$$\begin{aligned} \frac{d[AA]}{dt} = & \frac{[AA]_0 - [AA]}{\tau_{AA}} + \\ & + k_{AA} \cdot MM([Ca^{2+}]_c^2, k_{mAA}^2) - \\ & - k_{AA, buf}[AA] - \\ & - (k_{EETs} \cdot MM([AA]^2, k_{mEETs}^2) + \\ & + k_{PGE_2} \cdot MM([AA]^2, k_{mPGE_2}^2)) \cdot MM(PO_2^2, k_{mPO_2}^2). \end{aligned} \quad (6)$$

To model the dynamics of $[AA]$, we take into account (see Fig. 1) that an increase in the calcium level in astrocytes stimulates the release of AA , which, on the one hand, is released from the astrocytes endfeet into the extracellular space and blood vessels, leading to a further increase in the level of 20-HETE [4] (see (10)–(11)), and on the other hand, is used for oxygen-dependent synthesis of AA derivatives [19]. Therefore, the rate of $[AA]$ production depends on $[Ca^{2+}]_c$ concentration, and the flow rate is related to the formation of vasodilatory metabolites, such as $EETs$

and PGE_2 . The last term in the equation describes the leakage of $[AA]$ from the astrocyte into the extracellular space and then into the smooth muscle of the circulatory system. The value of $[AA]$, as well as the partial pressure of oxygen PO_2 determine the production of vasodilatory metabolites [19], the equations for $[EETs]$ and $[PGE_2]$ have the following forms (the last terms in the equations describe the external influence on the system):

$$\begin{aligned} \frac{d[EETs]}{dt} = & \frac{[EETs]_0 - [EETs]}{\tau_{EETs}} + \\ & + k_{EETs} \cdot MM([AA]^2, k_{mEETs}^2) \times \\ & \times MM(PO_2^2, k_{mPO_2}^2) + f_{EETs}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[PGE_2]}{dt} = & \frac{[PGE_2]_0 - [PGE_2]}{\tau_{PGE_2}} + \\ & + k_{PGE_2} \cdot MM([AA]^2, k_{mPGE_2}^2) \times \\ & \times MM(PO_2^2, k_{mPO_2}^2) + f_{PGE_2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Circulatory system

To describe the radius r of the circulatory system, we use the equation

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} = & \frac{r_0 - r}{\tau_r} + k_{r, NO}[NO] + \\ & + k_{r, EETs}([EETs] - [EETs]_0) + \\ & + k_{r, PGE_2}([PGE_2] - [PGE_2]_0) - \\ & - k_{r, HETE}([HETE] - [HETE]_0). \end{aligned} \quad (9)$$

We account that NO activates soluble guanylyl cyclase (sGC) – physiologic receptor for NO – and causes vasodilation [20]. We also include the vasodilatory effect of $EETs$ and PGE_2 , as well as vasoconstricting effect of 20-HETE [4]. To simplify our model we suppose that the velocity of the vascular radius change is linearly proportional to the deviation of metabolites from their respective stable concentrations. The respective coefficients were chosen by hand, so that the response of vascular radius to the changes in variables, would be in biophysical range. The last one designates the concentration of 20-HETE governed by the equation

$$\begin{aligned} \frac{d[HETE]}{dt} = & \frac{[HETE]_0 - [HETE]}{\tau_{HETE}} + \\ & + k_{HETE} \cdot MM([AA]_{ext}^2, k_{mHETE}^2) \times \\ & \times MM(PO_2^2, k_{mextPO_2}^2) + f_{HETE}, \end{aligned} \quad (10)$$

with the production rate determined by PO_2 and $[AA]_{ext}$ in smooth muscles. Here the leakage of arachidonic acid from the astrocyte into the smooth muscle



is described by the equation

$$\frac{d[AA]_{ext}}{dt} = k_{AA,buf}[AA] - k_{HETE} \times MM([AA]_{ext}^2, k_{mHETE}^2) \cdot MM(PO_2^2, k_{m_{ext}PO_2}^2). \quad (11)$$

Intercellular space

The connection between the elements of NGVU is described by variables responsible for the partial pressure of oxygen PO_2 , which depends on the radius of the blood vessel and decreases due to oxygen consumption by the brain ($CMRO_2$), the concentration of nitric oxide $[NO]$, the value of which depends on PO_2 , as well as the release of glutamate $[Glu]$, determined by the concentration of potassium $[K]_o$, increasing as a result of neuronal activity:

$$\frac{dPO_2}{dt} = \frac{PO_2^0 - PO_2}{\tau_{PO_2}} + k_{PO_2,r}(r_0 - r) - CMRO_2 \cdot PO_2; \quad (12)$$

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{[NO]_0 - [NO]}{\tau_{NO}} + k_{NO} \cdot MM(PO_2^2, k_{mNO}^2); \quad (13)$$

$$\frac{d[Glu]}{dt} = \frac{[Glu]_0 - [Glu]}{\tau_{Glu}} + k_K \bar{v}([K]_o). \quad (14)$$

NO plays an important regulatory role in the functioning of NGVU components and depends on a large number of endo- and exogenous factors [21], but to minimize the complexity of the proposed model, we restrict ourselves to the representation of neuronal nitric oxide synthase depending on the value of partial pressure of oxygen [22], while NO is formed by the oxidation of nitrogen. For the model simplicity we represent that the simulated effects in our model have a linear character and are MM-dependent, being aware of the fact that such a representation is a lot simplified. In this case, the normalized value of PO_2 is determined by the deviation of the vessel radius from its normal value, and the activation of glutamate occurs during the formation of neuronal activity.

Neuron

The model constructed in the work already contains a large number of variables. To fully describe the functioning of NGVU, we include a block responsible for describing neural activity. Modeling using the classical Hodgkin–Huxley formalism is numerically too complicated and redundant to achieve the goals set in the article. In this regard we use the minimalistic neuron model proposed in [23], considering the stimulation of the potassium membrane potential as a process that reflects the intensity of neuronal excitation. According to [23], we describe neuronal activity

in terms of variables $[K]_o$ and $[Na]_i$, which are the concentrations of intercellular potassium and sodium, respectively,

$$\begin{aligned} \frac{d[K]_o}{dt} = & \frac{[K]_{bath} - [K]_o}{\tau_K} - 2\gamma I_{pump} + \delta_K \bar{v}([K]_o) + \\ & + k_{K,PO_2} \cdot MM((PO_2 - PO_2^0)^2, k_{mK,PO_2}^2) + f_K, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\frac{d[Na]_i}{dt} = \frac{[Na]_i^0 - [Na]_i}{\tau_{Na}} - 3I_{pump} + \delta_{Na} \bar{v}([K]_o), \quad (16)$$

where the Na^+/K^+ pump current is taken from [24] in the form

$$I_{pump} = \frac{\rho k_{Kpump} \cdot MM(PO_2^2, k_{mPump}^2)}{(1 + \exp(3.5 - [K]_o))(1 + \exp((25 - [Na]_i)/3))}, \quad (17)$$

while the firing rate of an excitatory population is described as

$$\bar{v}([K]_o) = \begin{cases} 0, & \text{if } [K]_o < 4.5; \text{ otherwise} \\ -63.9093 + 20.0921[K]_o - \\ -1.53505([K]_o)^2 + \\ + 0.0533615([K]_o)^3 - \\ -0.000690027([K]_o)^4. \end{cases} \quad (18)$$

Equations (15)–(18) are a minimal and sufficient set to adequately describe neuron activity without drastically increasing computational complexity. In doing so, we include in the equation for potassium the dependence on the deviation of PO_2 from the normal value, based on the experimental data from [25].

Results

In the numerical simulation we use the set of parameters associated with IP_3 -dependent calcium dynamics in the astrocyte described in the previous work [18]. The values of the parameters for other elements of NGVU and their connections are given in Table 1. The modeling parameters were chosen in a way to reproduce the known *in vivo* dynamics of model variables.

In order to test the model, we simulate two scenarios of model behavior: an external influence leading to an increase in neuronal potassium (Fig. 2, *a*), and an external influence on $EETs$ (Fig. 2, *b*). In Fig. 2, *a* we stimulate the neural element of the system by means of an external influence in the time interval 400–550 seconds with potassium at a rate of $[K]_{ext} = 0.03 \text{ mM} \cdot \text{s}^{-1}$. As a result, there are oscillations in potassium and sodium. In this case, when the value 4.5 is exceeded by $[K]_o$, the firing rate function $\bar{v}([K]_o)$ is activated, and $[Glu]$ burst



Table 1. Model parameters

$[AA]_0$	0.1 μM	τ_{AA}	0.1 s	k_{AA}	0.1 $\mu\text{M/s}$	k_{mAA}	0.3 μM
$[HETE]_0$	0.001 μM	τ_{HETE}	0.1 s	k_{HETE}	0.3 $\mu\text{M/s}$	k_{mHETE}	0.1 μM
$[EETs]_0$	0.035 μM	τ_{EETs}	0.1 s	k_{EETs}	1.95 $\mu\text{M/s}$	k_{mEETs}	0.01 μM
$[PGE_2]_0$	0.01 μM	τ_{PGE_2}	0.1 s	k_{PGE_2}	0.01 $\mu\text{M/s}$	k_{mPGE_2}	0.01 μM
$[Glu]_0$	0 μM	τ_{Glu}	0.1 s	k_K	0.1 μM	$CMRO_2$	0.6 s^{-1}
$[NO]_0$	0 μM	τ_{NO}	0.02 s	k_{NO}	8 $\mu\text{M/s}$	k_{mNO}	1 a.u.
PO_2^0	1.0 a.u.	τ_{PO_2}	0.05 s	k_{mPO_2}	0.3 a.u.	k_{mK,PO_2}	1.4 a.u.
r_0	0.1 mm	τ_r	0.5 s	$k_{m_{ex}PO_2}$	0.01 μM	k_{mPump}	1.4 a.u.
$[K]_{bath}$	3.0 mM	τ_K	100 s	k_{K,PO_2}	15 mM/s	$k_{PO_2,r}$	12 $\text{mm}^{-1}\text{s}^{-1}$
$[Na]_i^0$	10 mM	τ_{Na}	20 s	$k_{r,HETE}$	100 s^{-1}	k_{Kpump}	3 a.u.
SVR	0.6 a.u.	f_{EETs}	0; 0.25 $\mu\text{M/s}$	$k_{r,EETs}$	3.55 s^{-1}	$k_{AA,buf}$	0.1 s^{-1}
γ	10 a.u.	f_{HETE}	0; 0.02 $\mu\text{M/s}$	$k_{r,PGE2}$	0.1 s^{-1}	δ_K	0.02 mM
ρ	0.2 mM/s	f_K	0; 0.03 mM/s	$k_{r,NO}$	0.25 s^{-1}	δ_{Na}	0.03 mM

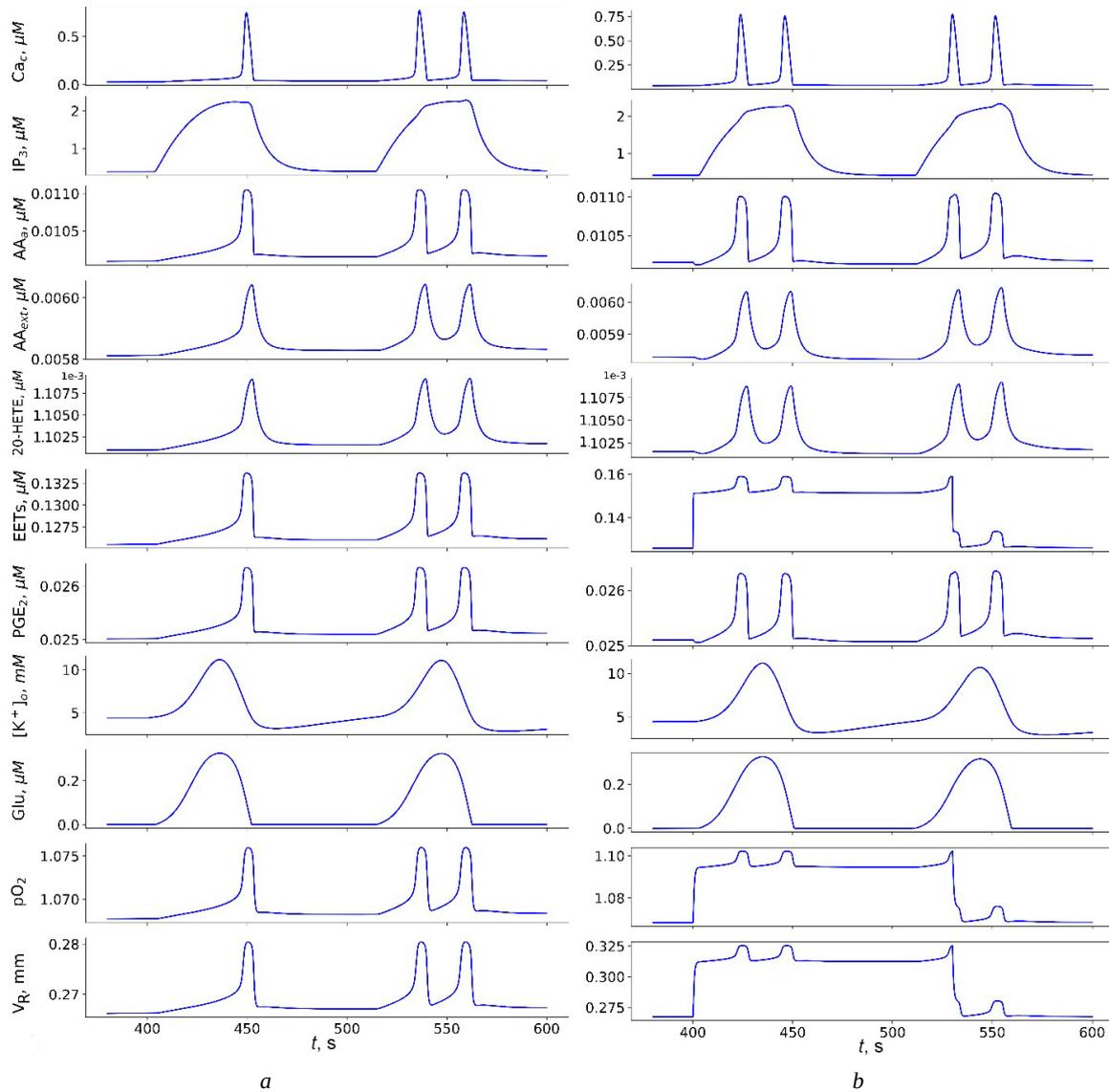


Fig. 2. Results of the numerical solution of the model: (a) potassium dynamics in neurons leads to the synthesis of AA metabolites; (b) an increase in the $[EETs]$ level leads to the amplification of neuronal and calcium astrocytic dynamics



occurs. In turn, glutamate triggers IP_3 -dependent calcium dynamics: it leads to the appearance of a flow J_{Glu} that increases the value of astrocytic $[IP_3]$ and further occurrence of $[Ca_c]$ oscillations. An increase in $[Ca_c]$ leads to the synthesis of $[AA]$ and its derivatives $[EETs]$ and $[PGE_2]$ and $[AA]$ leakage into the intercellular space and growth with the formation of $[HETE]$. Due to the impact of metabolites on the blood vessel, its radius r and partial pressure of oxygen PO_2 increase, stimulating the K^+ pump current. This loop results in oscillations in NGVU shown in Fig. 2, *a*.

The numerical solution of the model shows that NGVU activity can also be increased by external stimulation by vasodilating metabolites of AA. In Fig. 2, *b* we create an external pulse $f_{EETs} = 0.25 \mu M \cdot s^{-1}$ of the *EETs* metabolite over a time span of 400–550 s. As a result, there is a dilation of the vessel leading to an increase in the partial pressure of oxygen which turns on the K^+ pump current, triggering further activation of the firing rate function, release of $[Glu]$ and emergence of IP_3 -dependent calcium oscillations, which finally leads to an oscillatory regime occurrence. After the end of the external influence of *EETs*, we see the last biforked peak and then the system stabilizes.

Depending on the type of influence of AA metabolites on vascular tone, it is possible not only to increase the activity of the NGVU, but also to

damp oscillatory dynamics. So, Fig. 3 shows the solution of the model, in which, starting from 400 seconds, a continuous external stimulation of the system with potassium was performed at a rate of $[K]_{ext} = 0.03 \mu M \cdot s^{-1}$. However, starting at 800 seconds, the metabolite *20-HETE* is added to the system at an external pulse intensity of $f_{HETE} = 0.02 \mu M \cdot s^{-1}$. As a result, we have vasoconstriction and disappearing of any activity.

Discussion

The proposed model includes the main processes occurring within and between the elements of NGVU. At the present stage of neuroscience development, a sufficient amount of data has been accumulated confirming that there is a “reverse” effect of the vasomotor activity rhythms on the excitation patterns of neurons. This fact allows us to consider vessels as a full-fledged component of the brain computing center, which contribute to information processing as well as neurons and astrocytes, while most models of cerebral circulation describe neurovascular interactions exclusively in the neuron \rightarrow vessel direction. Currently, there is no complete model that takes into account all the key mechanisms of blood flow control during the CSD wave.

Based on recent experimental studies, we supplement the model with processes associated with

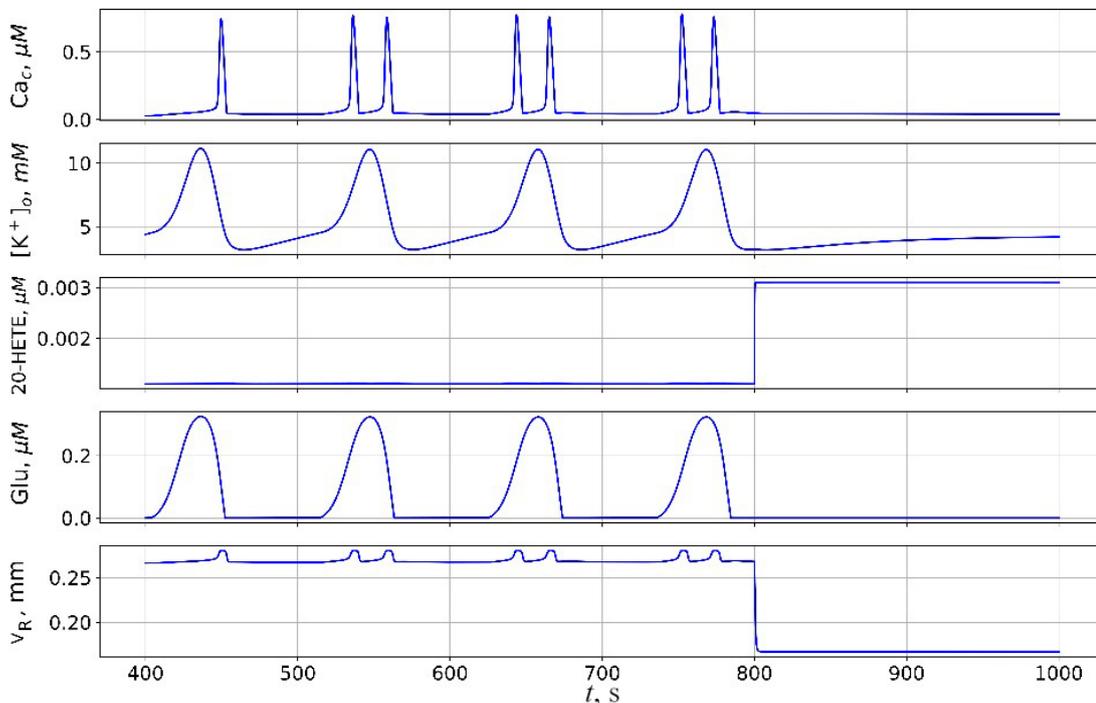


Fig. 3. Results of the numerical solution of the model: External stimulation by *20-HETE* leads to the suppression of neuronal and astrocytic calcium activity



the synthesis of AA in the astrocyte and further synthesis of acid derivatives directly in the astrocyte and smooth muscle layer of the blood vessel. The proposed model takes into account the effect of AA metabolites on the blood vessel radius, determining the blood flow and further activity of the elements of NGVU. To avoid excessive complexity, we neglect various potential regulatory mechanisms in modeling (in particular, the effect of neuromodulators on NGVU activity, background activity of *NO* synthase, calcium transients in astrocyte endfeet), and describe several processes with a sufficient degree of simplification (for example, we model the effect of PGE_2 on vessels as a direct one, since it has not yet been established whether PGE_2 promotes vasodilation by acting on astrocytes or directly on smooth muscle cells; we consider a minimalistic model of neuronal activity through potassium dynamics, thereby not including depolarization mechanisms of vascular smooth muscle under sufficiently high potassium levels). Nevertheless, the proposed model made it possible for the first time to reproduce the complex interactions of neurons, astrocytes, and blood vessels, taking into account the significant contribution made by the dynamics of AA and its metabolites. Despite a large number of simplifications, the model successfully simulates the experimentally observed processes associated with the effect of astrocytic calcium dynamics on the formation of AA and further on the activity of neurons through vasomodulatory roles of AA metabolites [26], the dependence of AA synthesis on oxygen concentration in the nervous tissue [19], the bidirectional (constriction/dilation) regulation of vascular tone by AA metabolites [4], including the competitive roles of vasomodulators PGE_2/EEt_2 and *20-HETE*, an increase in the level of which can be used to reduce blood flow and inhibit increased activity [2].

In the future, it is planned to extend the model to a spatial case that takes into account the spatial morphology of an astrocyte in order to study the features of the formation of spatially propagating waves and pathways to control them. The first step in this direction is represented in Figs. 2, 3 which can promote the search for selective pathways to control the activity of the elements of NGVU associated with the external stimulation by AA metabolites, the combined action of which can regulate vascular tone by dilation or constriction of the blood vessel. It is assumed that the proposed model has good prospects for understanding the pathways of regulation of blood flow and neuronal activity, which can be used, among other things, to develop new therapeutic approaches to reduce the

degenerative consequences of ischemic brain damage that occurs in stroke, Alzheimer's disease, and various traumatic brain injuries.

The model proposed in the work made it possible to describe a number of essential processes that determine the activity of the nervous tissue, and can serve not only as an appropriate tool for the theoretical study of processes in the nervous tissue, but also as a basis for a model study of ways to manipulate the balance of blood flow supply and neuronal activity through stimulation of the synthesis of AA metabolites.

References

1. Kettenmann H., Hanisch U. K., Noda M., Verkhratsky A. Physiology of microglia. *Physiol. Rev.*, 2010, vol. 91, pp. 461–553. <https://doi.org/10.1152/physrev.00011.2010>
2. Li Z., McConnell H. L., Stackhouse T. L., Pike M. M., Zhang W., Mishra A. Increased 20-HETE signaling suppresses capillary neurovascular coupling after ischemic stroke in regions beyond the infarct. *Front. Cell. Neurosci.*, 2021, vol. 15, article no. 762843. eCollection 2021. <https://doi.org/10.3389/fncel.2021.762843>
3. Petzold G. C., Murthy V. N. Role of astrocytes in neurovascular coupling. *Neuron*, 2011, vol. 71, pp. 782–97. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2011.08.009>
4. Koehler R. C., Gebremedhin D., Harder D. R. Role of astrocytes in cerebrovascular regulation. *J. Appl. Physiol.*, 2006, vol. 100, pp. 307–317. <https://doi.org/10.1152/jappphysiol.00938.2005>. <https://doi.org/10.1126/science.1156120>
5. Schummers J., Yu H., Sur M. Tuned responses of astrocytes and their influence on hemodynamic signals in the visual cortex. *Science*, 2008, vol. 320, pp. 1638–1643. <https://doi.org/10.1126/science.1156120>
6. Shen X. Y., Gao Z. K., Han Y., Yuan M., Guo Y. S., Bi X. Activation and Role of Astrocytes in Ischemic Stroke. *Front. Cell. Neurosci.*, 2021, vol. 15, article no. 755955. <https://doi.org/10.3389/fncel.2021.755955>
7. Abusnaina A., Abdullah R. Spiking Neuron Models: A Review. *JDCTA*, 2014, vol. 8, pp. 14–21. <https://doi.org/10.3390/brainsci12070863>
8. Manninen T., Havela R., Linne M. L. Computational Models for Calcium-Mediated Astrocyte Functions. *Front. Comput. Neurosci.*, 2018, vol. 12, article no. 14. <https://doi.org/10.3389/fncom.2018.00014>
9. Huneau C., Benali H., Chabriat H. Investigating Human Neurovascular Coupling Using Functional Neuroimaging: A Critical Review of Dynamic Models. *Front. Neurosci.*, 2015, vol. 9, pp. 467. <https://doi.org/10.3389/fnins.2015.00467>
10. Iadecola C., Yang G., Ebner T. J., Chen G. Local and propagated vascular responses evoked by focal synaptic activity in cerebellar cortex. *J. Neurophysiol.*, 1997, vol. 78, pp. 651–659. <https://doi.org/10.1152/jn.1997.78.2.651>



11. Iadecola C. The Neurovascular Unit Coming of Age: A Journey through Neurovascular Coupling in Health and Disease. *Neuron*, 2017, vol. 96, pp. 17–42. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2017.07.030>
12. Farr H., David T. Models of neurovascular coupling via potassium and EET signaling. *J. Theor. Biol.*, 2011, vol. 286, pp. 13–23. <https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2011.07.006>
13. Kenny A., Plank M. J., David T. The role of astrocytic calcium and TRPV4 channels in neurovascular coupling. *J. Comput. Neurosci.*, 2018, vol. 44, pp. 97–114. <https://doi.org/10.1007/s10827-017-0671-7>
14. Chander B. S., Chakravarthy V. S. A computational model of neuro-glio-vascular loop interactions. *PLoS ONE*, 2012, vol. 7, article no. e48802. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0048802>
15. Tesler F., Linne M.-L., Destexhe A. A key role of astrocytic calcium dynamics to link neuronal activity with the BOLD signal. *bioRxiv*, 2021, article no. 04.23.441146. <https://doi.org/10.1101/2021.04.23.441146>
16. Nippert A., Biesecker K., Newman E. Mechanisms Mediating Functional Hyperemia in the Brain. *Neuroscientist*, 2018, vol. 24, pp. 73–83. <https://doi.org/10.1177/1073858417703033>
17. Ullah G., Jung P., Cornell-Bell A. H. Anti-phase calcium oscillations in astrocytes via inositol (1, 4, 5)-trisphosphate regeneration. *Cell Calcium*, 2006, vol. 39, pp. 197–208. <https://doi.org/10.1016/j.ceca.2005.10.009>
18. Verisokin A. Yu., Vervevko D. V., Postnov D. E., Brazhe A. R. Modeling of astrocyte networks: towards realistic topology and dynamics. *Front. Cell. Neurosci.*, 2021, vol. 15, article no. 645068. <https://doi.org/10.3389/fncel.2021.645068>
19. MacVicar B. A., Newman E. A. Astrocyte regulation of blood flow in the brain. *Cold Spring Harb. Perspect. Biol.*, 2015, vol. 7, article no. a020388. <https://doi.org/10.1101/cshperspect.a020388>
20. Chen K., Pittman R. N., Popel A. S. Nitric oxide in the vasculature: where does it come from and where does it go? A quantitative perspective. *Antioxid. Redox Signal*, 2008, vol. 10, pp. 1185–1198. <https://doi.org/10.1089/ars.2007.1959>
21. Picón-Pagès P., Garcia-Buendia J., Muñoz F. J. Functions and dysfunctions of nitric oxide in brain. *Biochim. Biophys. Acta Mol. Basis Dis.*, 2019, vol. 1865, pp. 1949–1967. <https://doi.org/10.1016/j.bbadis.2018.11.007>
22. Wierocska J. M., Cieńlik P., Kalinowski L. Nitric Oxide-Dependent Pathways as Critical Factors in the Consequences and Recovery after Brain Ischemic Hypoxi. *Biomolecules*, 2021, vol. 11, no. 8, article no. 1097. <https://doi.org/10.3390/biom11081097>
23. Chizhov A. V., Zefirov A. V., Amakhin D. V., Smirnova E. Y., Zaitsev A. V. Minimal model of interictal and ictal discharges “Epileptor-2”. *PLoS Comput. Biol.*, 2018, vol. 14, article no. e1006186. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1006186>
24. Cressman J. R., Ullah G., Ziburkus J., Schiff S. J., Barreto E. The influence of sodium and potassium dynamics on excitability, seizures, and the stability of persistent states: I. Single neuron dynamics. *J. Comput. Neurosci.*, 2009, vol. 26, no. 2, pp. 159–170. <https://doi.org/10.1007/s10827-008-0132-4>
25. Jiang C., Haddad G. G. Oxygen deprivation inhibits a K⁺ channel independently of cytosolic factors in rat central neurons. *J. Physiol.*, vol. 481, pp. 15–26. <https://doi.org/10.1113/jphysiol.1994.sp020415>
26. Attwell D., Buchan A., Charpak S., Lauritzen M., MacVicar B. A., Newman E. Glial and neuronal control of brain blood flow. *Nature*, 2010, vol. 468, pp. 232–243. <https://doi.org/10.1038/nature09613>

Поступила в редакцию 03.03.2023; одобрена после рецензирования 20.03.2023; принята к публикации 24.03.2023

The article was submitted 03.03.2023; approved after reviewing 20.03.2023; accepted for publication 24.03.2023



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 150–156

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 150–156

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-150-156>, EDN: MVEHVR

Article



Fluorescent nanosized PAMAM dendrimers: One-step formation of a bright blue fluorophore on terminal groups and its optical properties

E. A. Mordovina[✉], V. A. Berdenkova, A. A. Bakal, D. V. Tsyupka, A. A. Kokorina, Yu. A. Podkolodnaya, O. A. Goryacheva, I. Yu. Goryacheva

Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Ekaterina A. Mordovina, mordovina_ekaterina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1773-9015>

Viktoria A. Berdenkova, berdenkova2003@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-6956-6762>

Artem A. Bakal, artembakal95@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3260-4744>

Daria V. Tsyupka, tsyupkadv@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4177-6257>

Alina A. Kokorina, alinaa.kokorina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5561-1488>

Yuliya A. Podkolodnaya, podkolodnaya00@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4642-9924>

Olga A. Goryacheva, olga.goryacheva.93@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0910-7694>

Irina Yu. Goryacheva, goryachevaiy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1781-6180>

Abstract. Background and Objectives: Polyamidoamine dendrimers (PAMAM) are nanoscale monodisperse compounds with a multifunctional terminal surface. Structural features of PAMAM, such as a nanosize of high homogeneity, highly developed terminal surface and cavities in the structure open up wide possibilities for their application. The most promising use of PAMAM is for biomedical purposes, in particular for the targeted drug delivery (for example, anticancer drugs). The interaction of PAMAM with target cells can be assessed using fluorescent imaging. This suggests the preliminary modification of PAMAM with various fluorescent molecules or the development of approaches to increase the intrinsic fluorescence of PAMAM. **Materials and Methods:** In this paper, we will consider a one-step modification of PAMAM based on the double cyclization reaction of PAMAM terminal groups and citric acid. Two approaches are chosen for modification: hydrothermal and boiling methods. The methods of optical spectroscopy and dynamic light scattering will be used as the main research tools. The methods used make it possible to determine the efficiency of fluorophore formation under given conditions. **Results:** In this work, we have proposed and implemented a one-step modification of PAMAM with a bright blue fluorophore (1,2,3,5-tetrahydro-5-oxo-imidazo[1,2-a]pyridine-7-carboxylic acid, IPCA), which is formed by a double cyclization reaction between citric acid and terminal ethylenediamine fragments of PAMAM. It has been shown that as a result of modification the hydrodynamic diameter of PAMAM does not change, the fluorescence intensity increases significantly (the quantum yield increases from < 1 to 28%), ζ -potential changes from 42 ± 5 to -24 ± 4 mV. **Conclusion:** Reaction of PAMAM and citric acid leads to the appearance of bright-blue fluorescence, which is significantly higher than the intrinsic fluorescence of PAMAM. A combination of bright fluorescence and a multifunctional terminal surface make it possible to further use the obtained structures for biovisualization

Keywords: PAMAM, citric acid, fluorescent nanostructures, one-step modification

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 21-73-10046). Dynamic light scattering measurements were performed using Zetasizer Ultra (Resource Sharing Center of Saratov State University).

For citation: Mordovina E. A., Berdenkova V. A., Bakal A. A., Tsyupka D. V., Kokorina A. A., Podkolodnaya Yu. A., Goryacheva O. A., Goryacheva I. Yu. Fluorescent nanosized PAMAM dendrimers: One-step formation of a bright blue fluorophore on terminal groups and its optical properties. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 150–156. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-150-156>, EDN: MVEHVR

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Научная статья

УДК 535.372

Флуоресцентные наноразмерные дендримеры ПАМAM: одностадийное образование ярко-синего флуорофора на концевых группах и его оптические свойства

E. A. Мордовина[✉], В. А. Берденкова, А. А. Бакал, Д. В. Цюпка, А. А. Кокорина, Ю. А. Подколodная, О. А. Горячева, И. Ю. Горячева

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Мордовина Екатерина Алексеевна, аспирант, сотрудник лаборатории неорганической химии, mordovina_ekaterina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1773-9015>

Берденкова Виктория Александровна, студент бакалавриата, berdenkova2003@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-6956-6762>

© Mordovina E. A., Berdenkova V. A., Bakal A. A., Tsyupka D. V., Kokorina A. A., Podkolodnaya Yu. A., Goryacheva O. A., Goryacheva I. Yu., 2023



Бакал Артем Алексеевич, аспирант, старший преподаватель кафедры общей и неорганической химии, artembakal95@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3260-4744>

Цюпка Дарья Владиславовна, аспирант, сотрудник лаборатории неорганической химии, tsyupkadva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4177-6257>

Кокорина Алина Андреевна, кандидат химических наук, alinaa.kokorina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5561-1488>

Подколотная Юлия Андреевна, магистрант, podkolodnaya00@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4642-9924>

Горячева Ольга Алексеевна, старший научный сотрудник лаборатории неорганической химии, olga.goryacheva.93@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0910-7694>

Горячева Ирина Юрьевна, доктор химических наук, профессор кафедры общей и неорганической химии, директор института химии, goryachevaiy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1781-6180>

Аннотация. Полиамидаминовые дендримеры (ПАМАМ) представляют собой наноразмерные монодисперсные соединения с многофункциональной концевой поверхностью. Структурные особенности ПАМАМ, такие как наноразмерность высокой однородности, сильно развитая концевая поверхность и полости в структуре, открывают широкие возможности для их применения. Наиболее интересным является использование ПАМАМ в биомедицинских целях, в частности для адресной доставки лекарственных препаратов (например, противоопухолевых). Взаимодействие ПАМАМ с клетками-мишенями можно оценить с помощью флуоресцентной визуализации. Это предполагает предварительную модификацию ПАМАМ различными флуоресцентными молекулами или разработку подходов для увеличения собственной флуоресценции ПАМАМ. В данной работе предложена и реализована одностадийная модификация ПАМАМ яркосиним флуорофором (1,2,3,5-тетрагидро-5-оксо-имидазо[1,2-а]пиридин-7-карбоновая кислота, ИПКК), который образуется в результате реакции двойной циклизации концевых групп ПАМАМ и лимонной кислоты. Показано, что в результате модификации гидродинамический радиус ПАМАМ не изменяется, значительно увеличивается интенсивность флуоресценции (квантовый выход увеличивается с <math><1\text{ до }28\text{ \%}</math>), ζ -потенциал изменяется с 42 ± 5 до -24 ± 4 мВ.

Ключевые слова: ПАМАМ, лимонная кислота, флуоресцентные наноструктуры, одностадийная модификация

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10046). Измерения динамического светорассеяния проводились с помощью Zetasizer Ultra (Центр коллективного пользования Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского).

Для цитирования: Мордовина Е. А., Берденкова В. А., Бакал А. А., Цюпка Д. В., Кокорина А. А., Подколотная Ю. А., Горячева О. А., Горячева И. Ю. Флуоресцентные наноразмерные дендримеры ПАМАМ: одностадийное образование яркосинего флуорофора на концевых группах и его оптические свойства // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 150–156. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-150-156>, EDN: MVEHVR

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

1. Introduction

Polyamidoamine dendrimers (PAMAM) are hyperbranched polymers with molecular uniformity, defined size and shape characteristics and a multifunctional terminal surface. These nanoscale polymers consist of an ethylenediamine core, a repetitive branching amidoamine internal structure and a primary amine terminal surface. Dendrimers are “grown” off a central core in an iterative manufacturing process, with each subsequent step representing a new “generation” of dendrimer. Increasing dendrimer generation produces larger molecular diameters and molecular weight, as well as an enhancement of reactive surface areas, which are functional keys to use of PAMAM dendrimers. PAMAM of low generations exhibit almost linear geometry, later generations show more globular-like shapes (G4.0 and above) [1]. The cavities that are intrinsically present in the globular shapes of PAMAM make them suitable agents for encapsulating and adsorbing biomolecules [2–4], and for use as prodrugs [5]. The ability of PAMAM to cross the blood-brain barrier makes their application for targeted antitumor therapy very promising [2, 6]. Perspectives of biomedical applications boost

the development of functional PAMAM derivatives, that combines intrinsic PAMAM carrier properties and functionality of modifiers: targeting ligands that provide address delivery [3, 7–10]; fluorescent molecules [7, 9] and/or contrast agents [3, 11] to simplify visualization of the target area by fluorescence and/or magnetic resonance contrast. As a rule, approaches to PAMAM surface modification are multi-stage and labor-intensive, which necessitates the development of simpler methods.

PAMAM dendrimers have very low intrinsic fluorescence (quantum yield <math><1\text{ \%}</math>), which limits their use for biomedical imaging, since the contrast between PAMAM fluorescence and cell autofluorescence is minimal [12–14]. Despite the existing approaches to increasing the intrinsic fluorescence of PAMAM (for example, oxidative treatment [14], acid-base transformation reactions [15] and solvent-induced PAMAM aggregation [16]), surface modification with fluorescent molecules is more effective [7–9].

In this work, we report the possibility to use terminal fragments of ethylenediamine of PAMAM G4.0 for reaction with citric acid (CA) to obtain PAMAM derivative (PAMAM–CA) with



bright blue fluorescence. This approach is based on the previously well described interaction of CA and amine -containing agents, particularly, 1,2-ethylenediamine (EDA), which produces a bright blue fluorophore (1,2,3,5-tetrahydro-5-oxoimidazo[1,2-a] pyridine-7-carboxylic acid, IPCA) as a result of the double cyclization reaction (Fig. 1). This reaction has already been considered for EDA and its low molecular weight derivatives [17–19], as well as for surface modification of silica nanoparticles with terminal amino groups [20], but has never been used to modify PAMAM. Thus, we describe two options for a simple one-step modification of PAMAM G4.0 with a bright blue fluorophore (IPCA) as a result of the reaction between the terminal fragments of PAMAM and CA; and study the properties of the modified PAMAM. The use of boiling under reflux at atmospheric pressure and hydrothermal treatment made it possible to obtain the modified fluorescent PAMAM with identical

characteristics. This is promising for creating drug delivery systems with the possibility of fluorescent visualization.

2. Experimental section

2.1. Modification PAMAM with a bright blue fluorophore (IPCA)

Two approaches of treatment of PAMAM and CA aqueous solutions were chosen for the PAMAM modification: boiling under reflux at atmospheric pressure and hydrothermal treatment in a closed volume (Fig. 2).

To modify PAMAM, a 10 wt.% solution of PAMAM G 4.0 in methanol was mixed with an aqueous solution of CA. The molar ratio of the reagents was 1 : 64 and the resulting concentrations were $7 \cdot 10^{-5}$ and $4.5 \cdot 10^{-3}$ mol/l for PAMAM and CA, respectively. For the boiling method, 10 ml of the resulting solution was transferred to a round

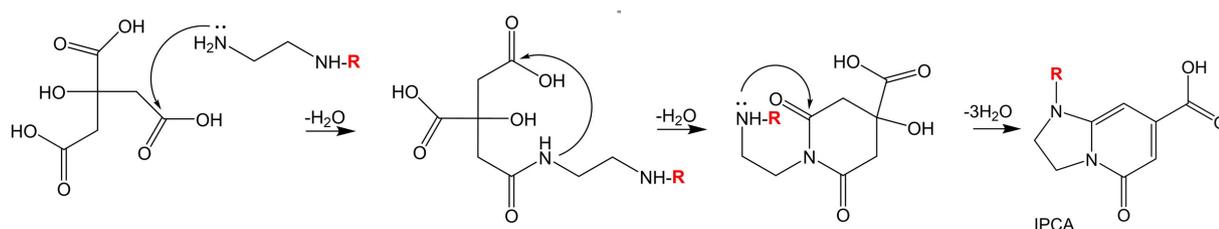


Fig. 1. Scheme of the formation mechanism of IPCA molecular fluorophore from CA and EDA-derived compound [18–20]

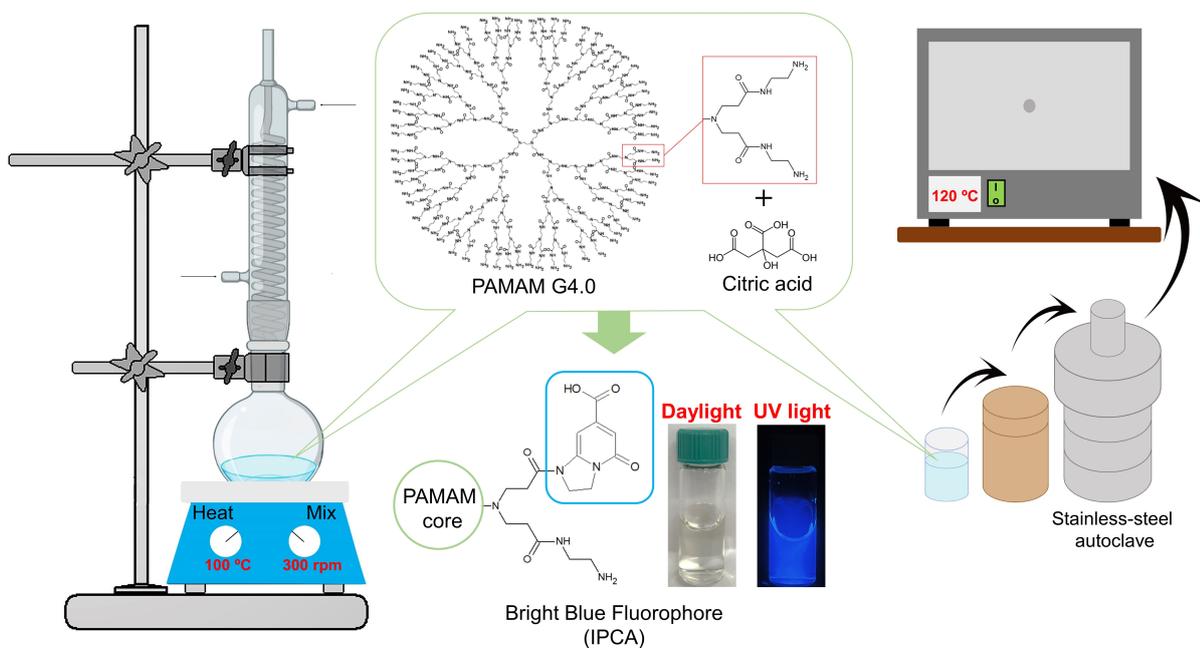


Fig. 2. Scheme of PAMAM modification with a bright blue fluorophore: Boiling under reflux (left) and hydrothermal treatment (right) (color online)



bottom flask connected to a reflux condenser and heated to 100°C for 4 hours (Fig. 2, left; boiling at atmospheric pressure). For the hydrothermal treatment, 4 ml of the resulting solution was transferred into a glass beaker inside a teflon-lined stainless-steel autoclave and heated at 120°C for 4 hours (Fig. 2, right; hydrothermal treatment). As a result of hydrothermal treatment of aqueous solutions, an increased pressure is created (~200 kPa a temperature of 120°C).

2.2. Characterization of samples

Absorption spectra were recorded by Shimadzu UV-1800 (Shimadzu Corporation, Kyoto, Japan). Emission and excitation spectra were obtained by a Cary Eclipse spectrometer (Agilent Technologies, Mulgrave, Victoria, Australia). The average diameter and zeta-potential (ζ -potential) of samples were analyzed with a Zetasizer Ultra (Malvern Panalytical, Worcestershire, UK).

2.3. Quantum yield calculation

Calculation of the quantum yield (QY) allows one to estimate the efficiency of emission. The relative QY of samples was calculated using quinine sulfate in 0.05 mol/l H₂SO₄ as a reference. The QY was calculated with the following equation:

$$\Phi_x = \Phi_{st} \cdot (A_x/A_{st}) \cdot (F_{st}/F_x) \cdot (n/n_o)^2,$$

where Φ is QY, A is absorbance at the excitation wavelength, F is the integrated emission area across the band, and n is the refractive index of the solvent containing the samples (n) and the reference (n_o). The subscript “st” refers to the referenced fluorophore (quinine sulfate in 0.05 mol/l H₂SO₄) with known QY and “x” refers as the samples for the determination of QY. Absorbance of the sample and the reference was kept 0.100 ± 0.002 at the excitation wavelength of 350 nm.

3. Results and Discussion

For PAMAM modification, we applied two options for a simple one-step modification, which is based on the double cyclization reaction between the terminal fragments of PAMAM and CA (the schemes in Figs. 1 and 2). We considered different data while choosing an optimal temperature for the hydrothermal treatment of PAMAM mixture with CA. As previously reported, the formation of IPCA occurs at lower temperatures (100–150°C) than the formation of by-products of carbonization of CA and amine-containing agents. However, the yield of

the product increases significantly with increasing synthesis temperature [17]. On the other hand, the possibility of PAMAM degradation with an increase of in temperature >120°C [15] demands limitation of the synthesis temperature. Thus, for the PAMAM modification, a temperature 120°C was used.

The absorption, excitation and normalized emission spectra of freshly prepared PAMAM aqua solutions are shown in Fig. 3, *a*. The absorption band of PAMAM is observed at 285 nm. The emission maximum of PAMAM is located in the region of 400 nm, while the effective excitation wavelength is 320 nm. The PAMAM fluorescence is a result of the dendrimers’ structural peculiarities, which is caused an $n \rightarrow \pi^*$ transition from the amido groups throughout the dendritic structure [13]. To exclude an increase in the PAMAM fluorescence under the action of thermal treatment and increased pressure, an aqueous solution of PAMAM (without additives) was processed under the conditions according to the scheme in Fig. 2. The optical properties of PAMAM, including emission intensity, have not been change after both variants of heat treatments. This clearly indicates the integrity of the polyamidoimine structure under heating.

According to the previously described studies, [17–20], IPCA can be obtained by the double cyclization reaction of CA and EDA as a result of boiling under reflux at atmospheric pressure, but with a small reaction yield. However, IPCA with a higher reaction yield can be obtained using the hydrothermal treatment, but at the same time a larger amount of high molecular weight by-products of CA and/or 1,2-ethylenediamine polycondensation is formed [17, 19]. Therefore, this approach was not considered in our work. Absorption, excitation and normalized emission spectra of the resulting fluorophore (EDA-CA) are shown in Fig. 3, *b*. The absorption band at 350 nm corresponds to $\pi \rightarrow \pi^*$ or $n \rightarrow \pi^*$ transitions. The emission maximum of the obtained structures is located in the region of 450–455 nm, while the effective excitation wavelength coincides with the absorption band and is 350 nm.

The use of two approaches to the modification of PAMAM leads to products with the identical optical characteristics, presented in Fig. 3, *c*. As a result of the thermal treatment of PAMAM with CA, a long-wavelength shift of the absorption band to the region of 370 nm in comparison with PAMAM without modification is registered. The emission maximum of the obtained structures is located in the

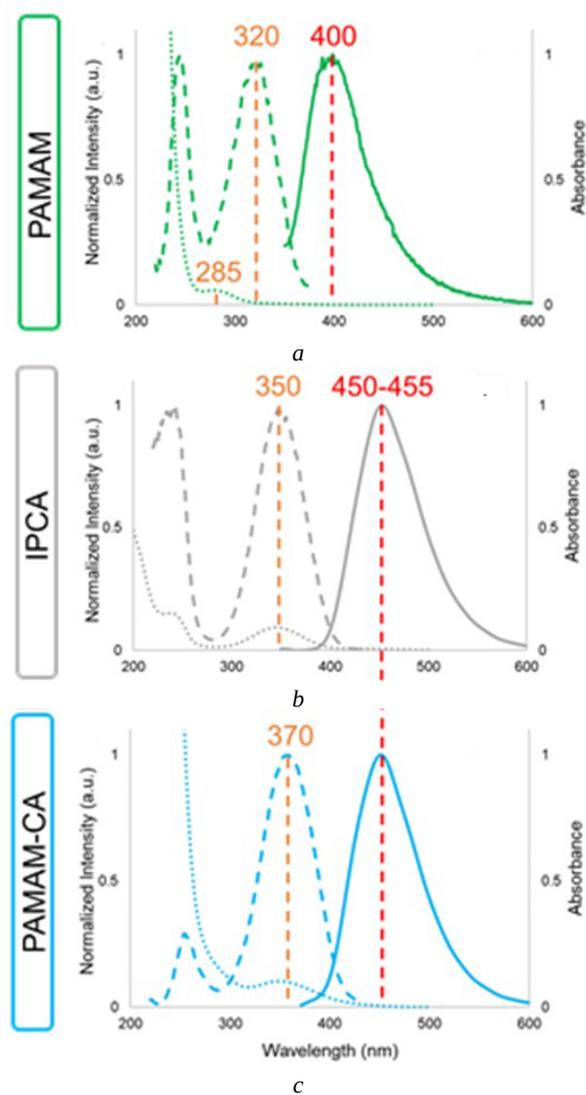


Fig. 3. Absorption (dot), excitation (dash) and normalized emission (solid) spectra of initial PAMAM (a), reaction product of EDA and CA (EDA-CA, IPCA) (b) and reaction product of PAMAM and CA (PAMAM-CA) (c) (color online)

region of 450–455 nm, while the effective excitation wavelength coincides with the absorption band and is 370 nm. The emission spectra of PAMAM-CA and EDA-CA (IPCA) are completely identical, that confirms the formation of the fluorophore at the terminal fragments of PAMAM. The change in the effective excitation band in comparison with the free fluorophore IPCA is most likely associated with

the size of the fragment (the PAMAM core) associated with the imidozolidine fragment of the IPCA [17–20]. As a result of modification, the PAMAM fluorescence is significantly increased compared to PAMAM without modification.

Since there were no significant differences in the optical properties of the samples obtained by the two approaches, further analysis was carried out for the samples obtained by boiling under reflux at atmospheric pressure, because for this synthesis it is easier to control the reproducibility of conditions.

To evaluate the efficiency of emission, the relative QY was measured (Table). The quantum yield of the product obtained by boiling EDA and CA (IPCA) was $57 \pm 2\%$. After PAMAM modification with CA, the PAMAM QY increases to $28 \pm 3\%$. This is significantly lower than that for the free IPCA fluorophore. This may be due to the fact that PAMAM-bound IPCA molecules are in suboptimal conditions compared to free IPCA molecules in solution or the formation of the fluorophore does not occur at all PAMAM terminal groups.

Dynamic light scattering data were obtained to characterize the size and charge of the obtained samples (Table). The hydrodynamic diameter and ζ -potential of initial PAMAM was 3.4 ± 0.5 nm and 42 ± 5 mV, respectively, which is fully consistent with literature data [21–23]. The positive charge of PAMAM is due to the protonation of the surface primary amino groups. As a result of the PAMAM modification, there was no significant change in the hydrodynamic size, while the ζ -potential value was -24 ± 4 mV. A dramatical change in the ζ -potential of the PAMAM-CA compared to the initial PAMAM confirms the formation of a fluorophore. The presence of IPCA carboxyl group on the PAMAM surface forms a negative charge. However, for PAMAM with terminal carboxyl groups, the potential value is -40 mV [22], which is lower than the value obtained for the PAMAM-CA. This confirms our assumption that the fluorophore formation does not occur for all terminal groups.

Thus, the combined thermal treatment of PAMAM and CA, leads to the formation of a bright blue fluorophore (IPCA) at the terminal fragments

Table. Fluorescence quantum yield (QY), hydrodynamic diameter and ζ -potential of initial PAMAM, reaction product of PAMAM and CA (PAMAM-CA) and reaction product of EDA and CA (EDA-CA, IPCA)

Sample	QY, %	Hydrodynamic diameter, nm	ζ -potential, mV
PAMAM	< 1 [13]	3.4 ± 0.5	42 ± 5
PAMAM-CA	28 ± 3	3.5 ± 0.7	-24 ± 4
EDA-CA (IPCA)	57 ± 2	–	–



of PAMAM (emission maximum at 450–455 nm). Boiling under reflux PAMAM with CA makes it possible to increase the QY of fluorescence up to $28 \pm 3\%$ from less than 1% of the initial PAMAM. The absence of changes in the hydrodynamic diameter of PAMAM–CA compared to PAMAM confirms the integrity of the polyamidoimine core.

4. Conclusions

As a result of the work, a simple one-step approach to the modification of PAMAM with a bright blue fluorophore (IPCA) has been proposed, which is implemented as a result of a double cyclization reaction between citric acid and terminal ethylenediamine fragments of PAMAM. Reaction of PAMAM and CA leads to the appearance of bright-blue fluorescence with a quantum yield of $28 \pm 3\%$, which is significantly higher than the intrinsic fluorescence of PAMAM. A combination of bright fluorescence and a multifunctional terminal surface makes it possible to further use the obtained structures for biovisualization.

References

1. Araújo R. V., Santos S. S., Ferreira E. I., Giarolla J. New advances in general biomedical applications of PAMAM dendrimers. *Molecules*, 2018, vol. 23, no. 11, article no. 2849. <https://doi.org/10.3390/molecules23112849>
2. Xu X., Li J., Han S., Tao C., Fang L., Sun Y., Zhu J., Liang Z., Li F. A novel doxorubicin loaded folic acid conjugated PAMAM modified with borneol, a nature dual-functional product of reducing PAMAM toxicity and boosting BBB penetration. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2016, vol. 88, pp. 178–190. <https://doi.org/10.1016/j.ejps.2016.02.015>
3. Tomalia D. A., Reyna L. A., Svenson S. Dendrimers as multi-purpose nanodevices for oncology drug delivery and diagnostic imaging. *Biochem. Soc. Trans.*, 2007, vol. 35, pp. 61–67. <https://doi.org/10.1042/BST0350061>
4. Parsian M., Mutlu P., Yalcin S., Tezcaner A., Gunduz U. Half generations magnetic PAMAM dendrimers as an effective system for targeted gemcitabine delivery. *International Journal of Pharmaceutics*, 2016, vol. 515, pp. 104–113. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2016.10.015>
5. Santos S., Ferreira E., Giarolla J. Dendrimer prodrugs. *Molecules*, 2016, vol. 21, article no. 686. <https://doi.org/10.3390/molecules21060686>
6. Srinageshwar B., Peruzzaro S., Andrews M., Johnson K., Hietpas A., Clark B., McGuire C., Petersen E., Kippe J., Stewart A., Lossia O., Al-Gharaibeh A., Antcliff A., Culver R., Swanson D., Dunbar G., Sharma A., Rossignol J. PAMAM dendrimers cross the blood–brain barrier when administered through the carotid artery in C57BL/6J mice. *International Journal of Molecular Sciences*, 2017, vol. 18, article no. 628. <https://doi.org/10.3390/ijms18030628>
7. Wen S., Liu H., Cai H., Shen M., Shi X. Targeted and pH-responsive delivery of doxorubicin to cancer cells using multifunctional dendrimer-modified multi-walled carbon nanotubes. *Advanced Healthcare Materials*, 2013, vol. 2, no. 9, pp. 1267–1276. <https://doi.org/10.1002/adhm.201200389>
8. Sifaka P. I., Üstündap N., Karavas E., Bikiaris D. N. Surface modified multifunctional and stimuli responsive nanoparticles for drug targeting: Current status and uses. *International Journal of Molecular Sciences*, 2016, vol. 17, no. 9, article no. 1440. <https://doi.org/10.3390/ijms17091440>
9. Fu F., Wu Y., Zhu J., Wen S., Shen M., Shi X. Multifunctional lactobionic acid-modified dendrimers for targeted drug delivery to liver cancer cells: investigating the role played by PEG spacer. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2014, vol. 6, no. 18, pp. 16416–16425. <https://doi.org/10.1021/am504849x>
10. Tsyupka D. V., Mordovina E. A., Sindeeva O. A., Sapelkin A. V., Sukhorukov G. B., Goryacheva I. Y. High-fluorescent product of folic acid photodegradation: Optical properties and cell effect. *J. Photochem. Photobiol. A*, 2021, vol. 407, article no. 113045. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2020.113045>
11. Venditto V. J., Regino C. A. S., Brechbiel M. W. PAMAM dendrimer based macromolecules as improved contrast agents. *Molecular Pharmaceutics*, 2005, vol. 2, no. 4, pp. 302–311. <https://doi.org/10.1021/mp050019e>
12. Wang D., Imae T. Fluorescence emission from dendrimers and its pH dependence. *Journal of the American Chemical Society*, 2004, vol. 126, no. 41, article no. 13204–13205. <https://doi.org/10.1021/ja0454992>
13. Golshan M., Gheitarani B., Salami-Kalajahi M., Hosseini M. S. Synthesis and characterization of fluorescence poly (amidoamine) dendrimer-based pigments. *Scientific Reports*, 2022, vol. 12, pp. 15180. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-19712-5>
14. Camacho C. S. Urgellés M., Tomás H., Lahoz F., Rodrigues J. New insights into the blue intrinsic fluorescence of oxidized PAMAM dendrimers considering their use as bionanomaterials. *Journal of Materials Chemistry B*, 2020, vol. 8, no. 45, pp. 10314–10326. <https://doi.org/10.1039/D0TB01871F>
15. Liang C., Huang J. F., Luo H., Sun D., Baker G. A., Dai S. Hydrophobic Bronsted Acid-Base Ionic Liquids Based on PAMAM Dendrimers with High Proton Conductivity and Blue Photoluminescence. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, vol. 127, no. 37, pp. 12784–12785. <https://doi.org/10.1021/ja053965x>
16. Jasmine M. J., Kavitha M., Prasad E. Effect of solvent-controlled aggregation on the intrinsic emission properties of PAMAM dendrimers. *Journal of Luminescence*, 2009, vol. 129, no. 5, pp. 506–513. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2008.12.005>
17. Song Y., Zhu S., Zhang S., Fu Y., Wang L., Zhao X., Yang B. Investigation from chemical structure to photoluminescent mechanism: A type of carbon dots from the pyrolysis of citric acid and an amine. *Journal of*



- Materials Chemistry C*, 2015, vol. 3, no. 23, pp. 5976–5984. <https://doi.org/10.1039/C5TC00813A>
18. Kasprzyk W., Bednarz S., Żmudzki P., Galica M., Bogdai D. Novel efficient fluorophores synthesized from citric acid. *RSC Advances*, 2015, vol. 5, no. 44, pp. 34795–34799. <https://doi.org/10.1039/c5ra03226a>
 19. Kokorina A. A., Bakal A. A., Shpuntova D. V., Kostritskiy A. Y., Beloglazova N. V., Saeger S. De, Sukhorukov G. B., Sapelkin A. V., Goryacheva I. Y. Gel electrophoresis separation and origins of light emission in fluorophores prepared from citric acid and ethylenediamine. *Scientific Reports*, 2019, vol. 9, no. 1, article no. 14665. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-50922-6>
 20. Podkolodnaya Y. A., Kokorina A. A., Goryacheva I. Y. A Facile Approach to the Hydrothermal Synthesis of Silica Nanoparticle/Carbon Nanostructure Luminescent Composites. *Materials*, 2022, vol. 15, no. 23, article no. 8469. <https://doi.org/10.3390/ma15238469>
 21. Mukherjee S. P., Davoren M., Byrne H. J. *In vitro* mammalian cytotoxicological study of PAMAM dendrimers—towards quantitative structure activity relationships. *Toxicology In Vitro*, 2010, vol. 24, pp. 169–177. <https://doi.org/10.1016/j.tiv.2009.09.014>
 22. Dobrovolskaia M. A., Patri A. K., Simak J., Hall J. B., Semberova J. De Paoli Lacerda S. H., McNeil S. E. Nanoparticle size and surface charge determine effects of PAMAM dendrimers on human platelets *in vitro*. *Molecular Pharmaceutics*, 2012, vol. 9, no. 3, pp. 382–393. <https://doi.org/10.1021/mp200463e>
 23. Fox L. J., Richardson R. M., Briscoe W. H. PAMAM dendrimer-cell membrane interactions. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2018, vol. 257, pp. 1–18. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2018.06.0050001-8686>

Поступила в редакцию 10.03.2023; одобрена после рецензирования 28.03.2023; принята к публикации 03.04.2023
The article was submitted 10.03.2023; approved after reviewing 28.03.2023; accepted for publication 03.04.2023



ФИЗИКА АТОМНОГО ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 157–166
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 157–166
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-157-166>, EDN: DNUYIV

Article

Systematics of the Coulomb barrier characteristics resulting from M3Y nucleon-nucleon forces for reactions with heavy ions

I. I. Gontchar¹, M. V. Chushnyakova²✉, N. A. Khmyrova¹

¹Omsk State Transport University, 35 Marxa prospect, Omsk 644046, Russia

²Omsk State Technical University, 11 Mira prospect, Omsk 644050, Russia

Igor I. Gontchar, vigichar@hotmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9306-6441>

Maria V. Chushnyakova, maria.chushnyakova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0891-3149>

Natalya A. Khmyrova, nata_ruban@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0690-9138>

Abstract. In the literature, often the capture cross sections for spherical heavy-ions are calculated by virtue of the characteristics of the s-wave barrier: its energy, radius, and stiffness. We evaluate these quantities systematically within the framework of the double-folding model. For the effective nucleon-nucleon forces, the M3Y Paris forces with zero-range exchange part are used. The strength of this part is modified to fit the barrier energy obtained with the density-dependent finite-range exchange part. For the nucleon density, two options are employed. The first one (V-option) is based on the experimental charge densities. The second one, C-option, comes from the IAEA data base; these densities are calculated within the Hartree-Fock-Bogolubov approach. For both options, the analytical approximations are developed for the barrier energy, radius, and stiffness. The accuracy of these approximations is about 3% for the barrier energy and radius and about 10% for the stiffness. The proposed approximations can be easily used by everyone to estimate the capture cross sections within the parabolic barrier approximation.

Keywords: double-folding model, nucleon densities, characteristics of Coulomb barrier

Acknowledgements: This work was supported by the Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics "BASIS".

For citation: Gontchar I. I., Chushnyakova M. V., Khmyrova N. A. Systematics of the Coulomb barrier characteristics resulting from M3Y nucleon-nucleon forces for reactions with heavy ions. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 157–166. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-157-166>, EDN: DNUYIV

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC0-BY 4.0)

Научная статья
УДК 539.17.01

Систематика параметров кулоновских барьеров, вычисленных с использованием М3У нуклон-нуклонных сил, в реакциях с тяжёлыми ионами

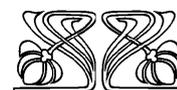
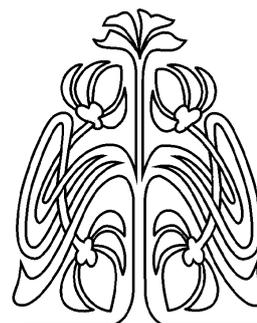
И. И. Гончар¹, М. В. Чушнякова²✉, Н. А. Хмырова¹

¹Омский государственный университет путей сообщения, Россия, 644046, г. Омск, пр. Маркса, д. 35

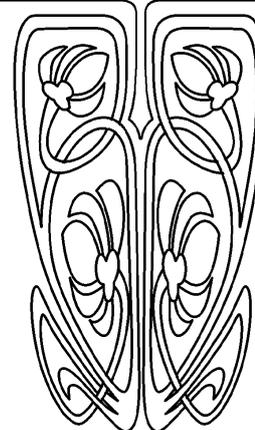
²Омский государственный технический университет, Россия, 644050, г. Омск, пр. Мира, д. 11

Гончар Игорь Иванович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Физика и химия», vigichar@hotmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9306-6441>

© Gontchar I. I., Chushnyakova M. V., Khmyrova N. A., 2023



**НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ**





Чушнякова Мария Владимировна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Физика», mvchushnyakova@omgtu.tech, <https://orcid.org/0000-0003-0891-3149>

Хмырова Наталья Анатольевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Физика и химия», nata_ruban@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0690-9138>

Аннотация. В литературе сечения слияния (захвата в орбитальное движение) для сложных сферических ядер часто вычисляются с помощью характеристик барьера, соответствующего лобовому столкновению: высоты барьера, его радиуса и жёсткости. В настоящей работе мы рассчитываем эти величины систематически в рамках модели двойной свёртки. В качестве эффективного нуклон-нуклонного (NN) взаимодействия используется парижское МЗУ взаимодействие с нулевым радиусом обменной части. Её амплитуда варьируется так, чтобы воспроизводить высоту барьера, полученного при использовании обменной части с конечным радиусом взаимодействия и плотностной зависимостью NN-взаимодействия. Для нуклонных плотностей использовано два варианта. Первый (V-опция) основан на экспериментальных зарядовых плотностях. Второй (C-опция) – это протонные и нейтронные плотности, вычисленные с помощью подхода Хартри–Фока–Боголюбова и опубликованные МАГАТЭ. Для обеих опций нами построены аналитические аппроксимации высоты барьера, его радиуса и жёсткости. Точность этой аппроксимации составляет около 3% для высоты барьера и около 10% для жёсткости. Предложенные аппроксимации могут быть полезны всем для быстрой оценки сечений захвата с помощью модели параболического барьера.

Ключевые слова: модель двойной свёртки, нуклонные плотности, параметры кулоновского барьера

Благодарности: Настоящая работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Для цитирования: Гончар И. И., Чушнякова М. В., Хмырова Н. А. Систематика параметров кулоновских барьеров, вычисленных с использованием МЗУ нуклон-нуклонных сил, в реакциях с тяжёлыми ионами // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 157–166. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-157-166>, EDN: DNUYIV

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

1. Introduction

Collision of two complex nuclei (heavy ions) resulting in the capture of them into orbital motion is the first step for formation of new superheavy chemical elements and/or isotopes [1–6]. The theoretical cross sections of the capture process are subject of significant uncertainties [6–8]. Often the capture cross sections for spherical colliding nuclei are evaluated as follows [9–12]:

$$\sigma_{ih} = \frac{\pi \hbar^2}{2m_R E_{c.m.}} \sum_J (2J+1) T_J, \quad (1)$$

$$T_J = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{2\pi(B_J - E_{c.m.})}{\hbar \omega_{BJ}} \right] \right\}^{-1}. \quad (2)$$

Here, $E_{c.m.}$ stands for the collision energy; J is the angular momentum in units of \hbar ; m_R is the reduced mass of colliding ions; B_J and ω_{BJ} are the Coulomb barrier energy and “frequency”, respectively. For the J -dependence of the barrier energy, the following approximation is often applied [10, 13, 14]:

$$B_J = B_0 + \frac{\hbar^2 J^2}{2m_R R_{B_0}^2}, \quad (3)$$

where B_0 and R_{B_0} are the s-wave barrier energy and radius, respectively. The J -dependence of ω_{BJ} is usually neglected, so

$$\omega_{BJ} = \sqrt{\frac{-C_{B_0}}{m_R}} \quad (4)$$

where C_{B_0} is the second derivative of the nucleus-nucleus potential with respect to the center-to-center distance.

Thus, for the fast evaluation of the capture cross section by means of Eq. (1), it is sufficient to know B_0 , R_{B_0} , C_{B_0} . For finding these quantities, one needs the s-wave nucleus-nucleus potential which consists of the Coulomb $U_C(R)$ and nuclear $U_n(R)$ terms.

The nuclear term (Strong nucleus-nucleus Potential, SnnP) is a crucial ingredient for any theoretical description of the capture process. Often for SnnP they use the Woods–Saxon profile [15–19]. The parameters of this profile (depth, diffuseness, and radius) are varied more or less arbitrary to fit σ_{ih} to the above barrier experimental capture cross sections. Obviously, the Woods-Saxon profile represents the SnnP only qualitatively.

The much better founded proximity potential [20, 21] is employed every now and again [22–26]. This potential includes a universal dimensionless function independent of the colliding nuclei. Yet some parameters of this potential can be varied individually for a given reaction.

The single-folding potential [27, 28] is more rigorous. For evaluating this potential one needs to know: (i) the distributions of the nucleon centers of mass (the nucleon densities) for both colliding nuclei; and (ii) the interaction energy between the whole target (projectile) nucleus and a nucleon of the projectile (target) nucleus. For the nucleon densities, the two-parameter Fermi profile was applied in [27–29]. The parameters of the profile might be obtained from the electron scattering data [30]. However, the electron scattering is only sensitive to the Coulomb interaction. Therefore, in such experi-



ments the charge density distribution is measured, not the nucleon density. The direct experimental information of the nucleon density is scarce [31–33]. For the second ingredient of the single-folding potential being the nucleon–nucleus potential, usually the Woods–Saxon profiles are used. Parameters of these profiles are extracted from the fit of the elastic scattering data [28]. Thus, the single-folding approach still has six individual fit parameters for a given reaction.

Employing the effective nucleon–nucleon forces (NN forces) seems to be the next step towards a more realistic description of the nucleus–nucleus potential. This step is realized in the double-folding (DF) model [34, 35]. The nucleon densities of the colliding nuclei are one more ingredient of this model. Three such DF potentials using different effective NN forces are known in the literature: i) with the M3Y ones [36,37]; ii) with the relativistic mean-field ones [8, 38, 39]; iii) with the Migdal forces [40, 41].

The aim of the present work is to calculate systematically the characteristics of the heavy-ion s -wave Coulomb barriers B_0 , R_{B0} , C_{B0} obtained within the framework of the DF approach with the M3Y NN forces and to explore whether there are any regularities in their behavior versus the approximate barrier energy

$$B_Z = \frac{Z_P Z_T}{A_P^{1/3} + A_T^{1/3}} \text{ MeV}. \quad (5)$$

The present paper is organized as follows. Section 2 is devoted to the DF model applied for the calculation of the nucleus–nucleus potential. The nucleon densities are discussed in Sec. 3. Sections 4 and 5 represent the results obtained for two sorts of densities. Conclusions are collected in Sec. 6.

2. The double-folding model

The nucleus–nucleus s -wave potential U_0 versus the distance R between the centers of mass of spherical projectile (P) and target (T) nuclei reads

$$U_0(R) = U_C(R) + U_{nD}(R) + U_{nE}(R). \quad (6)$$

Here U_C is the Coulomb term, U_{nD} and U_{nE} stand for the direct and exchange parts of the SnnP, respectively. These three terms read

$$U_C = \int d\vec{r}_P \int d\vec{r}_T \rho_{qP}(r_P) v_C(s) \rho_{qT}(r_T), \quad (7)$$

$$U_{nD} = \int d\vec{r}_P \int d\vec{r}_T \rho_{AP}(r_P) v_D(s) \rho_{AT}(r_T), \quad (8)$$

$$U_{nE} = \int d\vec{r}_P \int d\vec{r}_T \rho_{AP}(r_P) v_E(s) \rho_{AT}(r_T). \quad (9)$$

Here ρ_{AP} and ρ_{AT} (ρ_{qP} and ρ_{qT}) denote the nucleon (charge) densities, r_P and r_T are the absolute values of the radius-vectors of the interacting points of the projectile and target nuclei. Vector \vec{s} connects two interacting points and is determined by vectors \vec{R} , \vec{r}_P , and \vec{r}_T (see Fig. 2 in [42, 43] or Fig. 1 in [44, 45]). The point-point Coulomb potential is denoted as $v_C(s)$.

In Eqs. (7), (8), (9), we neglect the possible time-dependence of the densities. This so-called frozen density approximation (FDA) seems to work reasonably well unless the density overlap of the colliding nuclei is about 1/3 of the saturation density 0.16 fm^{-3} . Recently, the FDA was inspected carefully and compared with the adiabatic density approximation (ADA) in Ref. [46].

The direct part of the NN -interaction $v_D(s)$ consists of two Yukawa terms [47, 48]:

$$v_D(s) = \sum_{i=1}^2 G_{Di} \left[\exp\left(\frac{-s}{r_{vi}}\right) \right] / \left(\frac{s}{r_{vi}}\right). \quad (10)$$

For the exchange part $v_E(s)$, one finds in the literature two options: an advanced and complicated one with a finite range and a simpler one with zero range [42, 48]. Equation (9) is valid for the latter version for which

$$v_E(s) = G_E \delta(\vec{s}). \quad (11)$$

It has been demonstrated recently [44] that varying the value of G_E with respect to its standard value -592 MeV fm^3 from Ref. [37] down to -1040 MeV fm^3 allows to reproduce the Coulomb barrier energies resulting from the option with the finite range exchange force. Computer calculations with zero-range option are significantly faster than those ones with the finite range option. In the present paper, we apply Eqs. (9), (11) with $G_E = -1040 \text{ MeV fm}^3$.

+

3. Nucleon densities

In the present study, we employ two prescriptions for the nucleon densities coming from Refs. [30] and [49]. We denote them as V-densities and C-densities, respectively. In both sources [30] and [49], the density is approximated by the three-parameter Fermi formula (3pF-formula)

$$\rho_F(r) = \rho_{0F} \frac{1 - w_F r^2 / R_F^2}{1 + \exp[(r - R_F) / a_F]}. \quad (12)$$

Here R_F corresponds approximately to the half central density radius, a_F is the diffuseness, ρ_{0F} is



defined by a normalization condition. In Ref. [30], the 3pF-formula (or its version with $w_F = 0$ called 2pF-formula) is applied to approximate the experimental charge density (in this case the subscript F takes the value Vq). We use the same 3pF-formulas for proton ($F = Vp$) and neutron ($F = Vn$) densities for a given nucleus. The parameters R_{Vq} , a_{Vq} , and w_{Vq} of the charge density are taken from Ref. [30]. The half-density radii for protons R_{Vp} and neutrons R_{Vn} as well as w_{Vp} and w_{Vn} are taken to be equal to R_{Vq} and w_{Vq} , respectively, whereas the proton and neutron diffusenesses, a_{Vp} and a_{Vn} , are calculated via the charge diffuseness a_{Vq} [42, 43]:

$$a_{Vp} = a_{Vn} = \sqrt{a_{Vq}^2 - \frac{5}{7\pi^2} \left(0.76 - 0.11 \frac{N}{Z}\right)}. \quad (13)$$

We use all spherical nuclei for which Eq. (12) is available in Ref. [30]. The values of the parameters are presented in Table 1.

In Ref. [49], theoretical proton and neutron densities calculated within the Hartree–Fock–Bogolubov approach are approximated by Eq. (12) with $w_F = 0$. In this case, the subscript F takes the

values Cp , Cn , and Cq . We take $R_{Cq} = R_{Cp}$ and

$$a_{Cq} = \sqrt{a_{Cp}^2 + \frac{5}{7\pi^2} \left(0.76 - 0.11 \frac{N}{Z}\right)}. \quad (14)$$

The values of the parameters are again presented in Table 1.

4. Results: V-densities

In Fig. 1, *a*, we present the calculated s-wave Coulomb barrier energies B_{0V} . These calculations are performed for four groups of the reactions induced by: ^{16}O , ^{40}Ca , ^{58}Ni , and ^{88}Sr (symbols). This allows to cover a wide range of $B_Z = 12 \div 300$ MeV. The line in the figure corresponds to $B_0 = B_Z$. One sees that B_Z is indeed a good approximation for the DF M3Y barrier energies.

The fractional difference between these two quantities

$$\xi_B = \frac{B_0}{B_Z} - 1 \quad (15)$$

is displayed in Fig. 1, *b*. The symbols correspond to DF M3Y-calculations where the curve represents

Table 1. Parameters of Eq. (12) for the V- and C-densities for the spherical nuclei involved in the considered reactions. R_{Vq} , w_{Vq} , a_{Vq} of the charge V-densities are taken from Ref. [30] and a_{Vp} for the proton and neutron V-densities calculated according to Eq. (13). R_{Cp} , a_{Cp} , R_{Cn} , a_{Cn} for the proton and neutron C-densities are taken from Ref. [49] and a_{Cq} for the charge C-densities are calculated using Eq. (14)

Nuc.	R_{Vq} , fm	w_{Vq}	a_{Vq} , fm	a_{Vp} , fm	R_{Cp} , fm	a_{Cp} , fm	R_{Cn} , fm	a_{Cn} , fm	a_{Cq} , fm
^{16}O	2.608	-0.051	0.513	0.465	2.699	0.447	2.652	0.460	0.497
^{40}Ar	3.730	-0.190	0.620	0.582	3.657	0.480	3.564	0.532	0.525
^{40}Ca	3.766	-0.161	0.585	0.543	3.564	0.532	3.685	0.481	0.575
^{48}Ca	3.737	-0.030	0.524	0.481	3.887	0.467	3.989	0.493	0.512
^{48}Ti	3.843	0.000	0.588	0.548	3.942	0.477	3.979	0.478	0.523
^{52}Cr	4.010	0.000	0.497	0.449	4.064	0.467	4.085	0.470	0.514
^{54}Fe	4.075	0.000	0.506	0.458	4.145	0.463	4.127	0.463	0.511
^{58}Ni	4.309	-0.131	0.517	0.470	4.241	0.467	4.156	0.512	0.515
^{60}Ni	4.489	-0.267	0.537	0.492	4.274	0.471	4.128	0.532	0.518
^{62}Ni	4.443	-0.209	0.537	0.495	4.318	0.468	4.177	0.532	0.514
^{64}Ni	4.212	0.000	0.578	0.538	4.362	0.465	4.298	0.567	0.511
^{88}Sr	4.830	0.000	0.449	0.496	4.911	0.480	4.971	0.488	0.525
^{112}Sn	5.375	0.000	0.560	0.518	5.404	0.463	5.331	0.555	0.509
^{116}Sn	5.358	0.000	0.550	0.508	5.458	0.459	5.396	0.568	0.505
^{118}Sn	5.412	0.000	0.560	0.519	5.484	0.457	5.428	0.574	0.503
^{120}Sn	5.315	0.000	0.576	0.537	5.508	0.455	5.458	0.546	0.501
^{124}Sn	5.490	0.000	0.534	0.492	5.556	0.452	5.570	0.552	0.497
^{142}Nd	5.774	0.000	0.513	0.468	5.872	0.466	5.865	0.534	0.511
^{148}Sm	5.771	0.000	0.596	0.558	5.9548	0.4721	5.9360	0.5575	0.517
^{206}Pb	6.610	0.000	0.545	0.504	6.6800	0.4666	6.6999	0.5542	0.511



the following approximation

$$\xi_{BV} = 0.106 - 0.219 \cdot \exp\left(\frac{-B_Z}{16.1 \text{ MeV}}\right) - 0.230 \cdot \exp\left(\frac{-B_Z}{206 \text{ MeV}}\right). \quad (16)$$

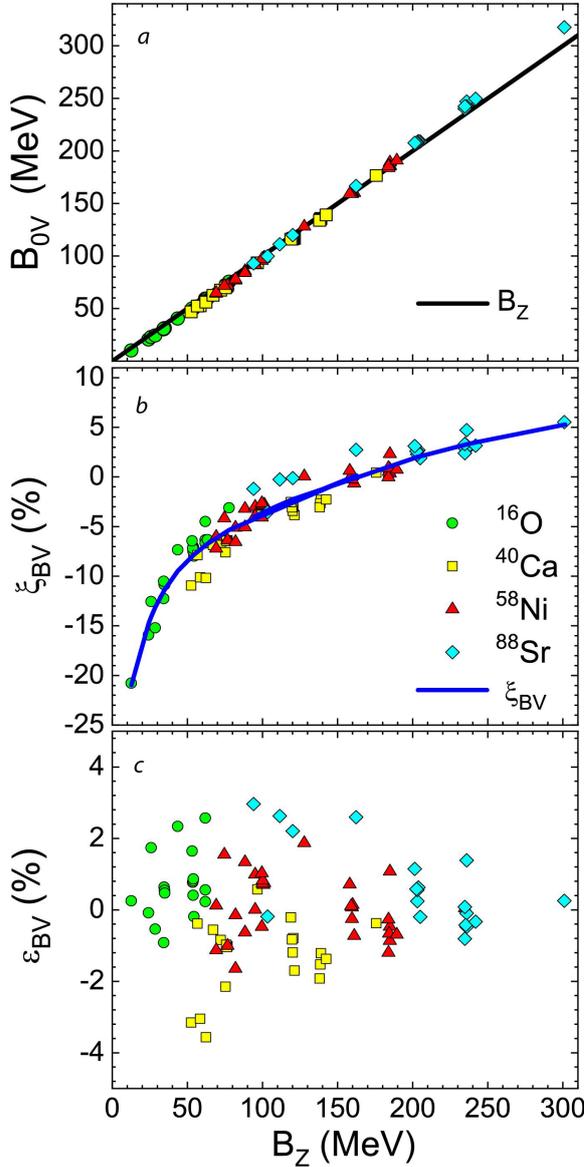


Fig. 1. (a) Calculated s-wave Coulomb barrier energies B_{0V} , (b) fractional barrier differences ξ_B (see Eq. (15)), and (c) errors ϵ_{BV} (see Eq. (17)) are shown as functions of the approximate barrier energy B_Z for four groups of the reactions induced by: ^{16}O , ^{40}Ca , ^{58}Ni , and ^{88}Sr (symbols). The line in panel (a) corresponds to $B_0 = B_Z$, the line in panel (b) is the approximation (see Eq. (16)) (color online)

Thus, employing Eqs. (5), (15), (16) one obtains the value of B_0 with the typical accuracy of

1–2% (see Fig. 1, c). We define the error of approximation for quantity x as

$$\epsilon_x = \frac{x_{fit}}{x_{calc}} - 1. \quad (17)$$

Let us go over to the stiffness of the barrier, C_{B0} . The calculated values are shown by symbols in Fig. 2, a, their linear fit reads

$$C_{B0V} = -0.755 \text{ MeV} - 0.0494 B_Z \quad (18)$$

(line in Fig. 2, a). Accuracy of this fit is typically within 10% (see Fig. 2, b) although for lighter reactions it reaches –20% due to smaller values of the stiffness.

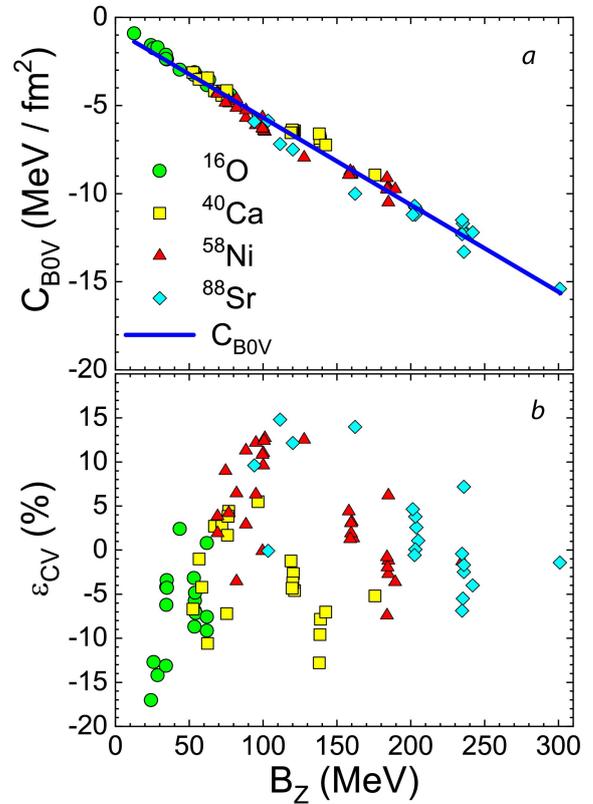


Fig. 2. (a) Barrier curvatures C_{B0V} and (b) errors ϵ_{CV} (see Eq. (17)) are shown as functions of B_Z for four groups of the reactions (symbols). The line in panel (a) is the approximation (see Eq. (18)) (color online)

The calculated barrier radii versus B_Z are shown by symbols in Fig. 3, a. However, their dependence upon $A_P^{1/3} + A_T^{1/3}$ is simpler and more regular (see Fig. 3, b). The linear fit of this dependence reads

$$R_{B0V}/\text{fm} = 3.89 + 0.918 \left(A_P^{1/3} + A_T^{1/3} \right) \quad (19)$$

(line in Fig. 3, b). Typical error of this fit is within 2% (see Fig. 3, c).

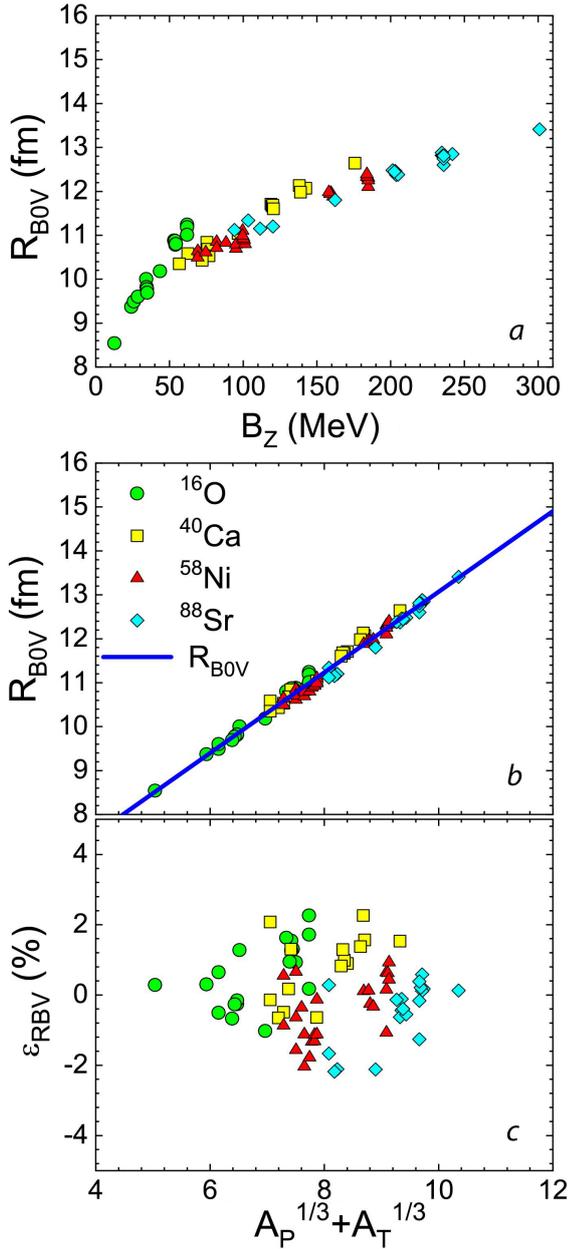


Fig. 3. (a) Barrier radii R_{B0V} as functions of B_Z , (b) the same R_{B0V} and (c) errors ϵ_{RV} (see Eq. (17)) versus $A_P^{1/3} + A_T^{1/3}$ are shown for four groups of the reactions (symbols). The line in panel (b) is the approximation (see Eq. (19)) (color online)

5. Results: C-densities

The same procedure, as in Sec. 4, was performed for C-densities. Results are shown in Figs. 4–6. The approximate formulas read

$$\xi_{BC} = 0.0591 - 0.212 \cdot \exp\left(\frac{-B_Z}{16.1 \text{ MeV}}\right) - 0.197 \cdot \exp\left(\frac{-B_Z}{155 \text{ MeV}}\right), \quad (20)$$

$$C_{B0C} = -0.752 \text{ MeV} - 0.04648 B_Z, \quad (21)$$

$$R_{B0C}/\text{fm} = 3.80 + 0.95 \left(A_P^{1/3} + A_T^{1/3} \right) \quad (22)$$

The quality of the fits is approximately as for the case of V-densities (see Figs. 4, c, 5, c, 6, c).

These three approximations for the characteristics of the s-wave Coulomb barrier obtained for V- and C-densities are compared in Fig. 7. Obviously, the trends for two versions of densities coincide with each other in all three panels. As reactions become heavier, the difference appears to be more significant. Although the pairs of curves are close to each other in Fig. 7, one should remember that several percent difference in the barrier energy might influence the fusion cross section substantially, especially for the near- and sub-barrier energies.

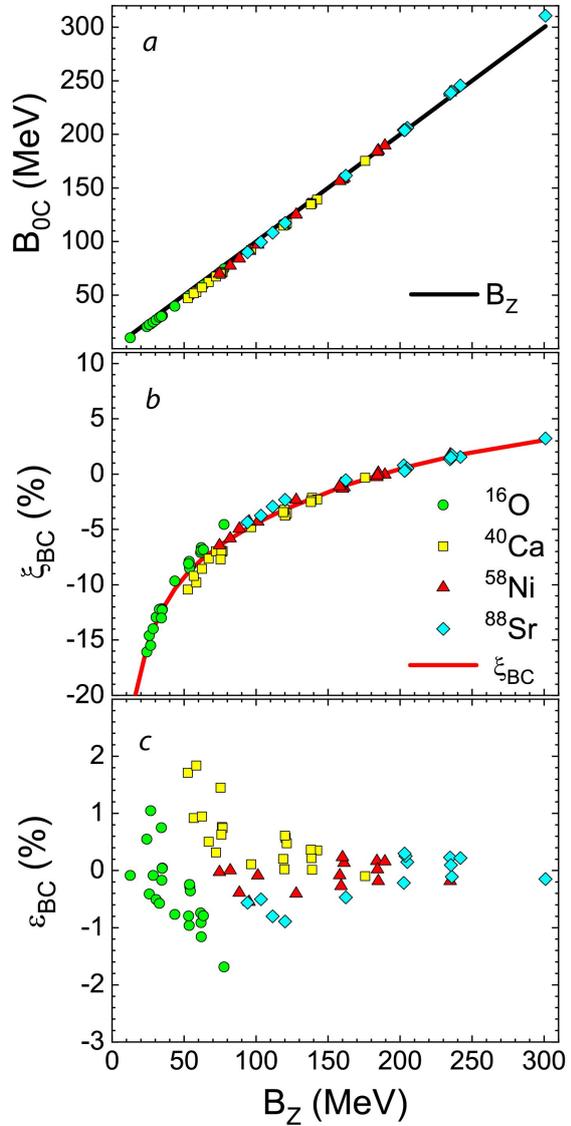


Fig. 4. Same as in Fig. 1 but for C-densities. The line in panel (b) corresponds to Eq. (20) (color online)

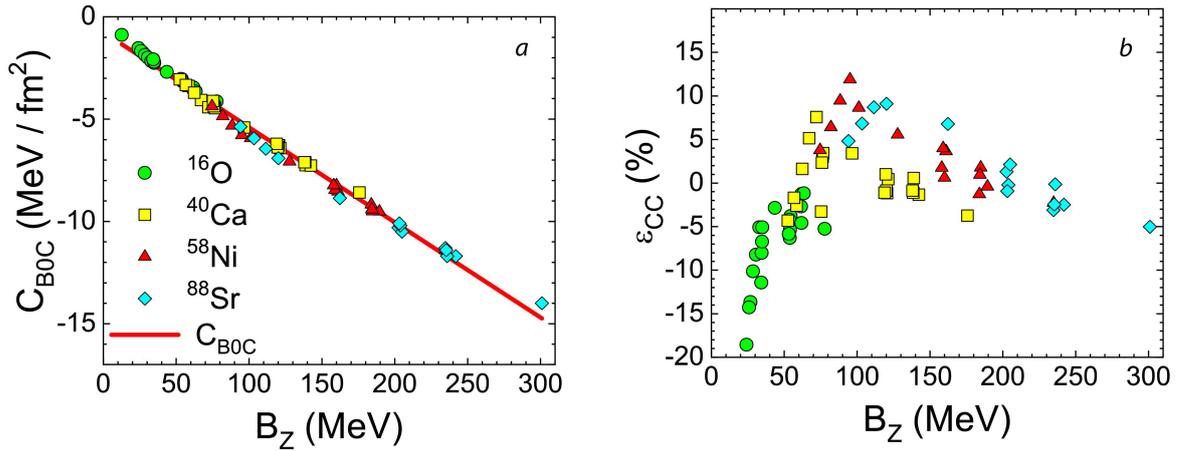


Fig. 5. Same as in Fig. 2 but for C-densities. The line in panel (a) corresponds to Eq. (21) (color online)

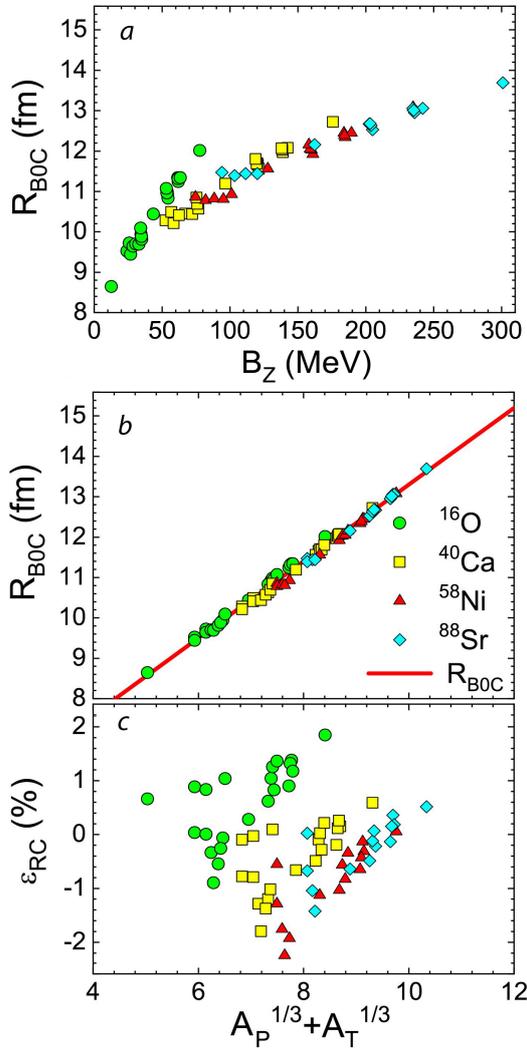


Fig. 6. Same as in Fig. 3 but for C-densities. The line in panel (b) corresponds to Eq. (22) (color online)

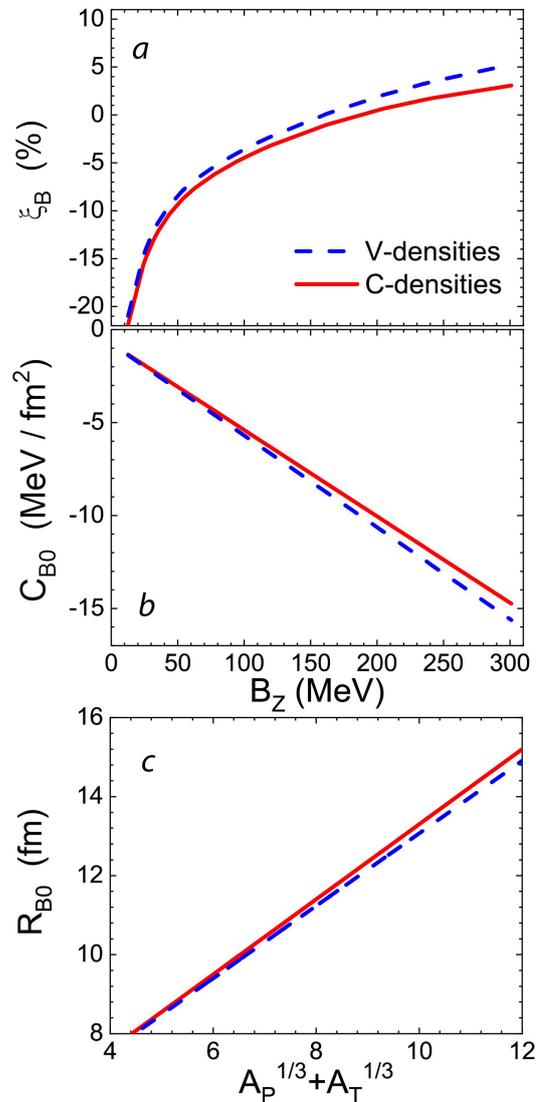


Fig. 7. Comparison between the approximations for the barrier characteristics obtained with V- and C-densities: (a) barrier energies B_0 (see Eqs. (16) and (20)), (b) barrier curvatures C_{B0} (see Eqs. (18) and (21)), and (c) barrier radii R_{B0} (see Eqs. (19) and (22)) (color online)



6. Conclusions

In the literature, every now and again, the spherical heavy-ion capture cross sections are evaluated using the characteristics of the s-wave barrier: its energy, radius, and stiffness. In the present work, we have calculated these quantities systematically within the framework of the double-folding (DF) model. In these calculations, for the effective nucleon-nucleon forces the M3Y Paris forces with zero-range exchange part have been used. The amplitude of this part has been modified to reproduce the barrier energy obtained with the density-dependent finite-range exchange part. For the nucleon density, two options have been used. The first one (V-option) is based on the experimental charge densities. The second one (C-option) has come from the IAEA data base.

For both options, the analytical approximations have been obtained for three quantities required for evaluation of the capture cross sections within the barrier penetration model (parabolic barrier approximation). The comparison of the V- and C-approximations demonstrates that those are not very different. The proposed approximations can be used by everyone for fast estimation of the capture cross sections in the collision of two spherical complex nuclei.

We would like to stress that in the literature there are many recipes for crucial ingredients of the DF model, namely the effective NN-forces and nucleon densities. For instance, in the literature sometimes the Reid M3Y forces [36] are used although in Ref. [37] it is clearly stated that “The Reid soft-core potential is based on earlier and partially erroneous phase-shift data”. The Migdal forces were used successfully in quantum diffusion model [41, 50, 51], however for this aim very special nucleon densities were employed. Application of the Migdal forces with densities coming from the Hartree-Fock SKX calculations [52] results in cross sections which do not leave any room for dissipation of collective energy [53]. We believe that the versions of NN-forces and densities used in the present work are the best which are available in the literature for systematic calculations. At the time being, we do not see any arguments allowing to prefer C- or V-option of the densities.

Of course, one would like to see an application of the proposed approximation for the analysis of experimental cross sections as well as a numerical analysis of the accuracy of approximate formulas (3) and (4). However, this would make the present

paper unjustifiably long and would distract the attention of the reader. We hope to complete such study in near future.

References

1. Hofmann S., Münzenberg G. The discovery of the heaviest elements. *Rev. Mod. Phys.*, 2000, vol. 72, pp. 733–767. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.72.733>
2. Berriman A. C., Hinde D. J., Dasgupta M., Morton C. R., Butt R. D., Newton J. O. Unexpected inhibition of fusion in nucleus–nucleus collisions. *Nature*, 2001, vol. 413, pp. 144–147. <https://doi.org/10.1038/35093069>
3. Oganessian Yu. Ts., Utyonkov V. K. Superheavy nuclei from ^{48}Ca -induced reactions. *Nucl. Phys. A*, 2015, vol. 944, pp. 62–98. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2015.07.003>
4. Andreyev A. N., Antalic S., Ackermann D., Cocolios T. E., Comas V. F., Elseviers J., Franchoo S., Heinz S., Heredia J. A., Heßberger F. P., Hofmann S., Huysse M., Khuyagbaatar J., Kojouharov I., Kindler B., Lommel B., Mann R., Page R. D., Rinta-Antilla S., Sapple P. J., Šáro Š., Duppen P. Van, Venhart M., Watkins H. V. α decay of $^{180,181}\text{Pb}$. *Phys. Rev. C*, 2009, vol. 80, article no. 054322. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.80.054322>
5. Kalaninová Z., Andreyev A. N., Antalic S., Heßberger F. P., Ackermann D., Andel B., Drummond M. C., Hofmann S., Huysse M., Kindler B., Lane J. F. W., Liberati V., Lommel B., Page R. D., Rapisarda E., Sandhu K., Šáro Š., Thorntwaite A., Duppen P. Van. α decay of the very neutron-deficient isotopes $^{197-199}\text{Fr}$. *Phys. Rev. C*, 2013, vol. 87, article no. 044335. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.044335>
6. Loveland W. An experimentalist’s view of the uncertainties in understanding heavy element synthesis. *Eur. Phys. J. A*, 2015, vol. 51, article no. 120. <https://doi.org/10.1140/epja/i2015-15120-2>
7. Newton J. O., Butt R. D., Dasgupta M., Hinde D. J., Gontchar I. I., Morton C. R., Hagino K. Systematics of precise nuclear fusion cross sections: The need for a new dynamical treatment of fusion? *Phys. Lett.*, 2004, vol. B586, pp. 219–224. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2004.02.052>
8. Chushnyakova M. V., Gontchar I. I., Khmyrova N. A. Detail study of application of the relativistic mean-field effective NN forces for heavy-ion fusion within a dynamical model. *J. Phys.*, 2021, vol. G48, article no. 015101. <https://doi.org/10.1088/1361-6471/ab907a>
9. Fröbrich P., Lipperheide R. *Theory of nuclear reactions*. Clarendon Press, Oxford, 1996. 476 p.
10. Ismail M., Ramadan K. A. Microscopic calculation of sub-barrier fusion cross section and barrier distribution using M3Y-type forces. *J. Phys.*, 2000, vol. G26, pp. 1621–1633. <https://doi.org/10.1088/0954-3899/26/10/312>
11. Zagrebaev V. I., Aritomo Y., Itkis M. G., Oganessian Yu. Ts., Ohta M. Synthesis of superheavy nuclei:



- How accurately can we describe it and calculate the cross sections? *Phys. Rev.*, 2001, vol. C65, article no. 014607. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.65.014607>
12. Chushnyakova M. V., Gontchar I. I. Oscillations of the fusion cross-sections in the $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ reaction. *Pramana*, 2015, vol. 85, pp. 653–665. <https://doi.org/10.1007/s12043-014-0917-0>
 13. Wong C. Y. Interaction Barrier in Charged-Particle Nuclear Reactions. *Phys. Rev. Lett.*, 1973, vol. 31, pp. 766–769. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.31.766>
 14. Glas D., Mosel U. Limitation on complete fusion during heavy-ion collisions. *Phys. Rev.*, 1974, vol. C10, pp. 2620–2622. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.10.2620>
 15. Leigh J. R., Dasgupta M., Hinde D. J., Mein J. C., Morton C. R., Lemmon R. C., Lestone J. P., Newton J. O., Timmers H., Wei J. X., Rowley N. Barrier distributions from the fusion of oxygen ions with $^{144,148,154}\text{Sm}$ and ^{186}W . *Phys. Rev.*, 1995, vol. C52, pp. 3151–3166. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.52.3151>
 16. Hagino K., Rowley N., Kruppa A. T. A program for coupled-channel calculations with all order couplings for heavy-ion fusion reactions. *Comp. Phys. Comm.*, 1999, vol. 123, pp. 143–152. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(99\)00243-X.CCFUL](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(99)00243-X.CCFUL)
 17. Morton C. R., Berriman A. C., Dasgupta M., Hinde D. J., Newton J. O., Hagino K., Thompson I. J. Coupled-channels analysis of the $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ fusion barrier distribution. *Phys. Rev.*, 1999, vol. C60, article no. 044608. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.60.044608>
 18. Jisha P., Vinodkumar A. M., Sanila S., Arjun K., Babu B. R. S., Gehlot J., Nath S., Madhavan N., Biswas R., Parihari A., Vinayak A., Mahato A., Prasad E., Visakh A. C. Role of positive transfer Q values in fusion cross sections for $^{18}\text{O}+^{182,184,186}\text{W}$ reactions. *Phys. Rev.*, 2022, vol. C105, article no. 054614. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.054614>
 19. Sun X.-X., Guo L. Microscopic study of compound-nucleus formation in cold-fusion reactions. *Phys. Rev.*, 2022, vol. C105, article no. 054610. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.054610>
 20. Błocki J., Randrup J., Świątecki W. J., Tsang C. F. Proximity forces. *Ann. Phys. N. Y.*, 1977, vol. 105, pp. 427–462.
 21. Myers W., Świątecki W. Nucleus-nucleus proximity potential and superheavy nuclei. *Phys. Rev.*, 2000, vol. C62, article no. 044610. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.62.044610>
 22. Zagrebaev V. I., Samarina V. V. Near-barrier fusion of heavy nuclei: Coupling of channels. *Phys. At. Nucl.*, 2004, vol. 67, pp. 1462–1477. <https://doi.org/10.1134/1.1788037>
 23. Bansal M., Chopra S., Gupta R. K., Kumar R., Sharma M. K. Dynamical cluster-decay model using various formulations of a proximity potential for compact non-coplanar nuclei: Application to the $^{64}\text{Ni}+^{100}\text{Mo}$ reaction. *Phys. Rev.*, 2012, vol. C86, article no. 034604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.034604>
 24. Ghodsi O. N., Gharaei R. Analysis of heavy-ion fusion reactions at extreme sub-barrier energies using the proximity formalism. *Phys. Rev.*, 2013, vol. C88, article no. 054617. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.88.054617>
 25. Kührtreiber J., Hille P., Forstner O., Friedmann H., Pavlik A., Priller A. $^{6,7}\text{Li}+^{27}\text{Al}$ reactions close to and below the Coulomb barrier. *Phys. Rev.*, 2021, vol. C103, article no. 064605. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.064605>
 26. Wen P. W., Lin C. J., Jia H. M., Yang L., Yang F., Huang D. H., Luo T. P., Chang C., Zhang M. H., Ma N. R. New Coulomb barrier scaling law with reference to the synthesis of superheavy elements. *Phys. Rev.*, 2022, vol. C105, article no. 034606. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.034606>
 27. Gross D. H. E., Kalinowski H. Friction model of heavy-ion collisions. *Phys. Rep.*, 1978, vol. 45, pp. 175–210. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(78\)90031-5](https://doi.org/10.1016/0370-1573(78)90031-5)
 28. Fröbrich P. Fusion and capture of heavy ions above the barrier: Analysis of experimental data with the surface friction model. *Phys. Rep.*, 1984, vol. 116, pp. 337–400. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(84\)90162-5](https://doi.org/10.1016/0370-1573(84)90162-5)
 29. Litnevsky V. L., Pashkevich V. V., Kosenko G. I., Ivanyuk F. A. Description of synthesis of super-heavy elements within the multidimensional stochastic model. *Phys. Rev.*, 2014, vol. C89, article no. 034626. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.89.034626>
 30. Vries H. De, Jager C. W. De, Vries C. De. Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering. *At. Data Nucl. Data Tables*, 1987, vol. 36, pp. 495–536. [https://doi.org/10.1016/0092-640X\(87\)90013-1](https://doi.org/10.1016/0092-640X(87)90013-1)
 31. Terashima S., Sakaguchi H., Takeda H., Ishikawa T., Itoh M., Kawabata T., Murakami T., Uchida M., Yasuda Y., Yosoi M., Zenihiro J., Yoshida H. P., Noro T., Ishida T., Asaji S., Yonemura T. Proton elastic scattering from tin isotopes at 295 MeV and systematic change of neutron density distributions. *Phys. Rev.*, 2008, vol. C77, pp. 024317. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.77.024317>
 32. Sakaguchi H., Zenihiro J. Proton elastic scattering from stable and unstable nuclei –Extraction of nuclear densities. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 2017, vol. 97, pp. 1–52. [https://doi.org/10.1016/0092-640X\(87\)90013-1](https://doi.org/10.1016/0092-640X(87)90013-1)
 33. Miller G. A. Coherent-nuclear pion photoproduction and neutron radii. *Phys. Rev.*, 2019, vol. C100, article no. 044608. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.044608>
 34. Sinha B. The optical potential and nuclear structure. *Phys. Rep.*, 1975, vol. 20, pp. 1–57. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(75\)90011-3](https://doi.org/10.1016/0370-1573(75)90011-3)
 35. Satchler G. R., Love W. G. Folding model potentials from realistic interactions for heavy-ion scattering. *Phys. Rep.*, 1979, vol. 55, pp. 183–254. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(79\)90081-4](https://doi.org/10.1016/0370-1573(79)90081-4)



36. Bertsch G., Borysowicz J., McManus H., Love W. G. Interactions for inelastic scattering derived from realistic potentials. *Nucl. Phys.*, 1977, vol. A284, pp. 399–419. [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(77\)90392-X](https://doi.org/10.1016/0375-9474(77)90392-X)
37. Anantaraman N., Toki H., Bertsch G. F. An effective interaction for inelastic scattering derived from the Paris potential. *Nucl. Phys.*, 1983, vol. A398, pp. 269–278. [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(83\)90487-6](https://doi.org/10.1016/0375-9474(83)90487-6)
38. Lahiri C., Biswal S. K., Patra S. K. Effects of NN potentials on p Nuclides in the $A \sim 100$ –120 region. *Int. J. Mod. Phys.*, 2016, vol. E25, article no. 1650015. <https://doi.org/10.1142/S0218301316500154>
39. Bhuyan M., Kumar R. Fusion cross section for Ni-based reactions within the relativistic mean-field formalism. *Phys. Rev.*, 2018, vol. C98, article no. 054610. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.98.054610>
40. Migdal A. B. *Theory of finite Fermi systems and application to atomic nuclei*. Interscience, New York, 1967. 319 p.
41. Kuzyakin R. A., Sargsyan V. V., Adamian G. G., Antonenko N. V. Quantum Diffusion Description of Large-Amplitude Collective Nuclear Motion. *Phys. Elem. Part. At. Nucl.*, 2017, vol. 48, pp. 21–118.
42. Gontchar I. I., Hinde D. J., Dasgupta M., Newton J. O. Double folding nucleus-nucleus potential applied to heavy-ion fusion reactions. *Phys. Rev.*, 2004, vol. C69, article no. 024610. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.69.024610>
43. Gontchar I. I., Chushnyakova M. V. A C-code for the double folding interaction potential of two spherical nuclei. *Comp. Phys. Comm.*, 2010, vol. 181, pp. 168–182. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.09.007>
44. Gontchar I. I., Chushnyakova M. V., Sukhareva O. M. Systematic application of the M3Y NN forces for describing the capture process in heavy-ion collisions involving deformed target nuclei. *Phys. Rev.*, 2022, vol. C105, article no. 014612. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.014612>
45. Chushnyakova M. V., Gontchar I. I., Sukhareva O. M., Khmyrova N. A. Modification of the effective Yukawa-type nucleon–nucleon interaction for accelerating calculations of the real part of the optical potential. *Moscow Univ. Phys. Bull.*, 2021, vol. 76, pp. 202–208. <https://doi.org/10.3103/S0027134921040056>
46. Chien L. H., Khoa D. T., Cuong D. C., Phuc N. H. Consistent mean-field description of the $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ optical potential at low energies and the astrophysical S factor. *Phys. Rev.*, 2018, vol. C98, article no. 064604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.98.064604>
47. Khoa D. T., Knyazkov O. M. Exchange effects in elastic and inelastic alpha- and heavy-ion scattering. *Zeitschrift Für Phys.*, 1987, Bd. A328, S. 67–79. <https://doi.org/10.1007/BF01295184>
48. Khoa D. T., Satchler G. R., Oertzen W. von. Nuclear incompressibility and density dependent NN interactions in the folding model for nucleus-nucleus potentials. *Phys. Rev.*, 1997, vol. C56, pp. 954–969. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.56.954>
49. Capote R., Herman M., Obložinský P., Young P. G., Goriely S., Belgya T., Ignatyuk A. V., Koning A. J., Hilaire S., Plujko V. A., Avrigeanu M., Bersillon O., Chadwick M. B., Fukahori T., Ge Z., Han Y., Kailas S., Kopecky J. Maslov V. M., Reffo G., Sin M., Soukhovitskii E. S., Talou P. RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. *Nucl. Data Sheets*, 2009, vol. 110, pp. 3107–3214. <https://doi.org/10.1016/J.NDS.2009.10.004>
50. Sargsyan V. V., Adamian G. G., Antonenko N. V., Scheid W., Zhang H. Q. Sub-barrier capture with quantum diffusion approach: Actinide-based reactions. *Eur. Phys. J. A.*, 2011, vol. 47, article no. 38. <https://doi.org/10.1140/epja/i2011-11038-y>
51. Sargsyan V. V., Adamian G. G., Antonenko N. V., Scheid W., Zhang H. Q. Astrophysical S factor, logarithmic slope of the excitation function, and barrier distribution. *Phys. Rev. C*, 2012, vol. 86, article no. 034614. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.034614>
52. Chushnyakova M. V., Bhattacharya R., Gontchar I. I. Dynamical calculations of the above-barrier heavy-ion fusion cross sections using Hartree–Fock nuclear densities with the SKX coefficient set. *Phys. Rev. C*, 2014, vol. 90, article no. 017603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.017603>
53. Gontchar I. I., Chushnyakova M. V. Describing the heavy-ion above-barrier fusion using the bare potentials resulting from Migdal and M3Y double-folding approaches. *J. Phys. G*, 2016, vol. 43, article no. 045111. <https://doi.org/10.1088/0954-3899/43/4/045111>

Поступила в редакцию 02.01.2023; одобрена после рецензирования 26.01.2023; принята к публикации 03.02.2023
The article was submitted 02.01.2023; approved after reviewing 26.01.2023; accepted for publication 03.02.2023

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 167–178
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 167–178
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-167-178>, EDN: GTHXWI

Научная статья
УДК 537.8

Корреляционные соотношения для графена и его тепловое излучение

М. В. Давидович^{1✉}, О. Е. Глухова^{1,2}

¹Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

²Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова, Россия, 119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2

Давидович Михаил Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиотехники и электродинамики, davidovichmv@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8706-8523>
Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, ¹заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики; ²ведущий научный сотрудник Института бионических технологий и инжиниринга, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>

Аннотация. Рассмотрено тепловое излучение листа графена, а также поглощаемая указаным листом мощность на единицу поверхности в термодинамическом равновесии с вакуумным излучением. Из сравнения этих величин установлены корреляционные соотношения для флуктуаций поверхностной плотности тока в графене и в аналогичном ему 2D проводящем листе, описываемым поверхностной проводимостью. Указанные соотношения следует использовать в теории дисперсионного взаимодействия структур с графеном, используя метод Рытова–Левина и Лифшица введения флуктуационных источников в уравнения Максвелла. Также рассмотрен радиационный теплообмен листов графена при разных температурах.

Ключевые слова: графен, корреляции, силы Казимира–Лифшица, тепловое излучение

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2023-0008).

Для цитирования: Давидович М. В., Глухова О. Е. Корреляционные соотношения для графена и его тепловое излучение // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 167–178. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-167-178>, EDN: GTHXWI

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Correlation relations for graphene and its thermal radiation

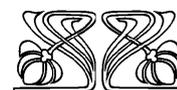
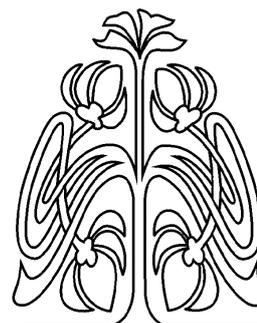
М. В. Davidovich^{1✉}, О. Е. Glukhova^{1,2}

¹Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

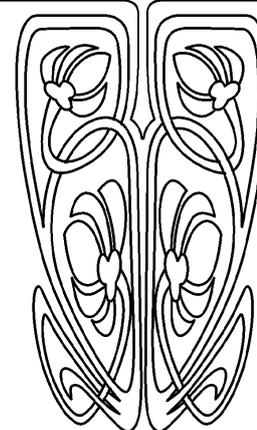
²I. M. Sechenov First Moscow State Medical University, Institute for Bionic Technologies and Engineering, 8-2 Trubetskaya St., Moscow 119991, Russia

Mikhail V. Davidovich, davidovichmv@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8706-8523>
Olga E. Glukhova, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>

Abstract. Background and Objectives: The thermal radiation of a graphene sheet is considered, as well as the power absorbed by the specified sheet per unit surface in the thermodynamic equilibrium with vacuum radiation. From the comparison of these values, correlation relations are



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





established for fluctuations in the surface current density in graphene and in a 2D conductive sheet similar to it, described by surface conductivity. These relations should be used in the theory of dispersion interaction of structures with graphene, using the Rytov–Levin and Lifshitz method of introducing fluctuation sources into Maxwell’s equations. **Model and Methods:** We consider the equilibrium of a graphene sheet with a Planck thermal field from the principle of detailed equilibrium. From this we get correlation relations. With their use, we obtain the density of thermal radiation. **Results:** The thermal radiation densities of a graphene sheet at different temperatures have been obtained, as well as the specific heat transfer between two graphene sheets at different temperatures. **Conclusion:** The obtained correlations may be used for calculations of dispersion forces.

Keywords: graphene, correlations, Casimir–Lifshitz forces, thermal radiation

Acknowledgements: This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of a state assignment (project No. FSRR-2023-0008).

For citation: Davidovic M. V., Glukhova O. E. Correlation relations for graphene and its thermal radiation. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 167–178 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-167-178>, EDN: GTHXWI

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC0-BY 4.0)

Введение

Рассмотрим бесконечный лист графена в вакууме при температуре T в термодинамическом равновесии с плотностью равновесного излучения [1]

$$\begin{aligned} u(\omega, T) &= \frac{\omega^2}{\pi c^3} \Theta(\omega, T) = \\ &= \frac{\omega^2}{\pi c^3} \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \right) = \\ &= \frac{\hbar\omega^3}{2\pi c^3} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right). \end{aligned} \quad (1)$$

В ней учтены вакуумные виртуальные фотоны с «нулевой» энергией $\hbar\omega/2$ и тепловые фотоны. Тепло переносится тепловыми фотонами с планковской плотностью излучения

$$u'(\omega, T) = f_{BE}(\omega, T) \hbar\omega^3 / (\pi c^3),$$

где $f_{BE}(\omega, T) = [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1}$ – функция Бозе–Эйнштейна. Графен является истинно 2D материалом, описываемым двумерной макроскопической проводимостью $\hat{\sigma}(\omega, \mathbf{k})$ [2–6]. Это означает, что при воздействии электрического поля плоской монохроматической электромагнитной волны $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega - i\mathbf{k}\mathbf{r})$ имеют место связи компонент поверхностного тока \mathbf{j} в графене с полем:

$$\begin{aligned} j_x(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) &= \sigma_{xx}(\omega, \mathbf{k}) E_x(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) + \\ &+ \sigma_{xy}(\omega, \mathbf{k}) E_y(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}), \\ j_y(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) &= \sigma_{yx}(\omega, \mathbf{k}) E_x(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) + \\ &+ \sigma_{yy}(\omega, \mathbf{k}) E_y(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}). \end{aligned}$$

Здесь $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$, точка $\mathbf{r} = \mathbf{r}_\tau$ находится на поверхности графена, а бесконечный лист графена считается расположенным в плоскости $(x, y, 0)$. Лист графена является поглотителем.

В то же время в силу флуктуаций тока в термодинамическом равновесии он излучает ровно столько, сколько поглощает. Считая тензор проводимости приведенным к главным осям, имеем $j_x(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sigma_{xx}(\omega, \mathbf{k}) E_x(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r})$, $j_y(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sigma_{yy}(\omega, \mathbf{k}) E_y(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r})$. В ряде работ в разных приближениях получена тензорная проводимость графена, например [2, 5]:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\omega, k_x) &= \\ &= \sigma_{\text{intra}}(\omega) \left[1 + \frac{v_F^2}{4(\omega - i\omega_c)^2} \left(3 - \frac{2i}{\omega/\omega_c} \right) k_x^2 \right] + \\ &+ \sigma_{\text{inter}}(\omega), \\ \sigma_{yy}(\omega, k_x) &= \\ &= \sigma_{\text{intra}}(\omega) \left[1 + \frac{v_F^2}{4(\omega - i\omega_c)^2} \left(3 - \frac{2i}{\omega/\omega_c} \right) k_y^2 \right] + \\ &+ \sigma_{\text{inter}}(\omega). \end{aligned}$$

Здесь $v_F = c/300$ м/с – скорость Ферми, ω_c – частота столкновений (обратное время релаксации импульса), а внутризонная и межзонная проводимости определяются формулами [3–5]

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{intra}}(\omega, \mu, \omega_c, T) &= \frac{-ie^2 k_B T}{\pi \hbar^2 (\omega - i\omega_c)} \Psi(\mu_c, T) = \\ &= \frac{\sigma_{0\text{intra}}}{1 + i\omega/\omega_c}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{inter}}(\omega, \mu, \omega_c) &= \\ &= \frac{-ie^2 (\omega - i\omega)}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{f_{FD}(-\varepsilon) + f_{FD}(\varepsilon)}{(\omega - i\omega)^2 - (2\varepsilon/\hbar)^2} d\varepsilon, \end{aligned} \quad (3)$$

где $f_{FD}(\varepsilon) = [\exp((\varepsilon - \mu_c)/k_B T) + 1]^{-1}$ – функция Ферми–Дирака. Для определения тензора проводимости здесь использована модель Бхатнагара–Гросса–Крука. В приближении времени релаксации для интеграла столкновений его величины имеют тот же порядок, но коэффициенты



несколько отличаются. В случае малых температур $k_B T \ll \mu_c$ и $k_B T \ll \omega \hbar$ межзонная проводимость аппроксимируется формулой

$$\sigma_{\text{inter}}(\omega, \mu, \omega_c) = \frac{-ie^2}{4\pi\hbar} \ln \left(\frac{2|\mu_c| - (\omega - i\omega_c)\hbar}{2|\mu_c| + (\omega - i\omega_c)\hbar} \right). \quad (4)$$

Указанные формулы получены путем приближенного вычисления интегралов по зоне Бриллюэна графена в модели линейного отклика Кубо при воздействии поля плоской волны, при этом берется только окрестность точек Дирака с линейной дисперсией. Именно такие электроны и дырки в основном и участвуют в квантовом транспорте. При больших частотах $\omega \gg \omega_c$ и $\omega \gg \mu_c/\hbar$ согласно формуле (4) $\sigma'_{\text{inter}} = e^2/(4\hbar)$, $\sigma''_{\text{inter}} = e^2\mu(1 - \alpha/\omega)/(\pi\hbar^2\omega) \approx e^2\mu/(\pi\hbar^2\omega)$, $\alpha = (|\mu_c|/\hbar)(1 + \omega^2/4(|\mu_c|/\hbar)^2)$. Однако в этом случае определяющий σ_{inter} интеграл (3) убывает обратно пропорционально частоте. Следовательно, при больших частотах формула не верна. Чтобы не вычислять этот интеграл можно использовать σ_{inter} с обрезывающим фактором $[1 + (\omega\hbar)^2/(k_B T + \mu)^2]^{-1}$. В нем величина $\Omega = (k_B T + \mu)/\hbar$ выступает как некая частота столкновений, соответствующая времени релаксации $\tau_r = 1/\Omega$ для межзонных переходов.

Свойства графена существенно зависят от наличия или отсутствия примесей, наличия или отсутствия внешних полей, при этом существенную роль играет внутризонная частота столкновений. Для чистого графена она может быть аппроксимирована согласно работе [6] соотношением $\omega_c = \omega_{0c}T/T_0$, где $\omega_{0c} = 8 \cdot 10^{11}$ Гц – частота столкновений при $T_0 = 300$ К. Есть и другие оценки ω_{0c} . Если энергия кванта больше энергии связи π -электронов (2.8 эВ), то указанные формулы не работают, а вклад таких электронов можно считать по 2D плазменной модели, когда каждый атом углерода отдает либо четыре, либо все шесть электронов в зону проводимости. Графен может иметь нелинейный отклик. Далее мы рассматриваем только линейную проводимость, пренебрегая пространственной дисперсией. Это можно сделать при малых $k^2 = \mathbf{k}^2$, что выполняется вплоть до оптических частот. Считая $\omega \gg \omega_c$, видим, что добавка из-за пространственной дисперсии в σ_{xx} даже при $k^2 = k_x^2 = k_0^2$ весьма мала. Далее мы не будем рассматривать тензорную проводимость, описывая любой 2D материал (графен, борофен, силицен и т. п.) скалярной проводимостью $\sigma(\omega)$, поскольку пространственная дисперсия

слабо влияет на дисперсионные силы, а результат ее учета весьма сложен. Для графена при низких частотах в пренебрежении межзонными переходами проводимость дается формулой (2) $\sigma(\omega) = \sigma_{\text{intra}}(\omega, \mu, \omega_c, T)$, где

$$\Psi(\mu, T) = \ln \left(2 + 2 \cosh \left(\frac{\mu}{k_B T} \right) \right),$$

т. е. она такая же, как в модели Друде с проводимостью $\sigma(0) = e^2 k_B T \Psi(\mu_c, T) / (\pi \hbar^2 \omega_c)$ на постоянном токе.

1. Корреляционные соотношения для плотности тока

Корреляционные соотношения важны в теории дисперсионных сил или сил Казимира–Лифшица, поскольку они позволяют определить корреляции полей через входящие флуктуационные источники в уравнения Максвелла [1,7]. Для наноструктур с графеновыми листами корреляционные силы важны как на малых расстояниях порядка долей нм (например, взаимодействие ван-дер-Ваальса в n -слойном графене или в графите), так и на расстояниях от нескольких до сотен нм, например наноструктурах с графеновыми в чешуйками. Корреляционные соотношения для анизотропной диэлектрической среды имеют вид [1]

$$\begin{aligned} & \left\langle J_{\alpha}^0(\omega, \mathbf{r}), J_{\beta}^0(\omega, \mathbf{r}') \right\rangle = \\ & = -i\omega\epsilon_0 \left[\epsilon_{\alpha\beta}^*(\omega) - \epsilon_{\beta\alpha}(\omega) \right] \Theta(\omega) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') / \pi, \end{aligned}$$

а для изотропного диэлектрика соответственно

$$\begin{aligned} & \left\langle J_{\alpha}^0(\omega, \mathbf{r}), J_{\beta}^0(\omega, \mathbf{r}') \right\rangle = \\ & = \epsilon_0 \epsilon''(\omega) \omega \Theta(\omega) \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') / \pi. \end{aligned}$$

Здесь $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega)$ и введены флуктуационные плотности тока $J_{\alpha}^0(\omega, \mathbf{r})$, $\alpha, \beta = x, y, z$. Скобки $\langle \rangle$ означают статистическое усреднение (усреднение по ансамблю) величин $J_{\alpha}^0(\omega, \mathbf{r}) J_{\beta}^{0*}(\omega, \mathbf{r}')$ [1]. В диэлектрике ток поляризации $\mathbf{J}^p(\omega, \mathbf{r}) = \partial_t \mathbf{P} = i\omega\epsilon_0 (\hat{\epsilon}(\omega, \mathbf{r}) - \hat{I}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{r})$ описывает все процессы поляризации, включая и проводимость, при этом величину $\hat{v} = i\omega\epsilon_0 (\hat{\epsilon}(\omega, \mathbf{r}) - \hat{I})$ можно трактовать как тензор удельной проводимости. Поскольку для графена формально $J_x^p(\omega) = j_x(\omega) \delta(z)$, $J_y^p(\omega) = j_y(\omega) \delta(z)$, $J_z^p(\omega) \equiv 0$, то следует ожидать следующего корреляционного соотношения:

$$\begin{aligned} & \left\langle j_{\alpha}^0(\omega, x, y), j_{\beta}^0(\omega, x', y') \right\rangle = F(\omega, T) = \\ & = \sigma'(\omega) \Theta(\omega, T) \delta_{\alpha\beta} \delta(x - x') \delta(y - y') / \pi, \end{aligned} \quad (5)$$



где $\sigma'(\omega, T)$ – реальная часть скалярной проводимости. Оно записано для компонент флуктуационной поверхностной плотности тока $j_\alpha^{(0,d)}(x, y)$, $\alpha, \beta = x, y$, а зависимость проводимости от температуры часто будем опускать: $\sigma'(\omega) = \text{Re}(\sigma(\omega))$. В работе [1] описан способ доказательства корреляционных соотношений, основанный на принципе детального равновесия: пластина из материала тела помещается в волновую зону тела и определяется количество тепла, полученное пластиной от тела и телом от пластины. При этом пластину следует считать большой, чтобы при расчете ее поглощения и излучения были применимы асимптотические формулы классической теории излучения [1]. Однако графен имеет нулевую (атомную) толщину, поэтому применимость (5) нуждается в обосновании. В (5) не входит мнимая (реактивная) часть проводимости. Однако поглощение листа графена должно от нее зависеть. Задачу для листа графена можно решить строго. Цель данной работы и состоит в получении соотношений типа (5) для листа тока, описываемого двумерной проводимостью. Определим правую часть (5) в виде $F(\omega, T) \Theta(\omega, T) \delta_{\alpha\beta} \delta(x - x') \delta(y - y')$, где $F(\omega, T)$ – пока неизвестная функция. Будем использовать безразмерную (нормированную) скалярную поверхностную проводимость $\xi(\omega) = \xi'(\omega) + i\xi''(\omega) = \sigma(\omega) \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$. Вводим квадрат волнового вектора в виде $\mathbf{k}^2 = \mathbf{q}^2 + k_z^2$, где $k_z = \sqrt{k_0^2 - k_x^2 - k_y^2} = \sqrt{k_0^2 - q^2}$.

Графеновый лист поглощает мощность теплового поля и одновременно излучает мощность с каждой единицы поверхности в пространство. При тепловом равновесии с полем эти мощности равны. Найдем мощность, излучаемую единицей площади графенового листа. Она определяется флуктуационными источниками и дается z -компонентой вектора Пойнтинга:

$$S_z^0(\omega, \mathbf{r}) = \text{Re}(E_x^0(\omega, \mathbf{r})H_y^{0*}(\omega, \mathbf{r}) - E_y^0(\omega, \mathbf{r})H_x^{0*}(\omega, \mathbf{r}))/2. \quad (6)$$

Это мощность, излученная вправо. Ее следует удвоить, учитывая мощность, излученную влево. Оба слагаемых в (6) дают равный вклад. Для компонент полей имеем [8]

$$E_x^{0,d}(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[(k_0^2 - k_x^2)j_x^{0,d}(\mathbf{q}) - k_x k_y j_y^{0,d}(\mathbf{q})] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - |z|\kappa}}{8\pi^2 i\omega \epsilon_0 \kappa} d^2 q, \quad (7)$$

$$E_y^{0,d}(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[(k_0^2 - k_y^2)j_y^{0,d}(\mathbf{q}) - k_x k_y j_x^{0,d}(\mathbf{q})] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - |z|\kappa}}{8\pi^2 i\omega \epsilon_0 \kappa} d^2 q, \quad (8)$$

$$E_z^{0,d}(\mathbf{r}) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k_z [k_x j_x^{(0,d)}(\mathbf{q}) + k_y j_y^{(0,d)}(\mathbf{q})] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - |z|\kappa}}{8\pi^2 i\omega \epsilon_0 \kappa} d^2 q, \quad (9)$$

$$H_x^{0,d}(\mathbf{r}) = \text{sgn}(z) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{j_y^{0,d}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - ik_z|z|}}{8\pi^2} d^2 q, \quad (10)$$

$$H_y^{0,d}(\mathbf{r}) = -\text{sgn}(z) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{j_x^{0,d}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - ik_z|z|}}{8\pi^2} d^2 q, \quad (11)$$

$$H_z^{0,d}(\mathbf{r}) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[k_x j_y^{0,d}(\mathbf{q}) - k_y j_x^{0,d}(\mathbf{q})] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - ik_z|z|}}{8\pi^2 k_z} d^2 q. \quad (12)$$

Эти соотношения записаны как для флуктуационных компонент (индекс 0), так и для дифракционных компонент (индекс d). Двойной пространственно-спектральный интеграл обозначен одним символом, $d^2 q = dk_x dk_y$. Для представления компонент электрического поля мы использовали величину $\kappa = -ik_z = -i\sqrt{k_0^2 - q^2}$. Эта величина действительная и равна $\sqrt{q^2 - k_0^2}$, если $k_0^2 < q^2$. Мы также использовали преобразование Фурье

$$\mathbf{j}^{0,d}(\omega, \mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{j}^{0,d}(\omega, \mathbf{r}_\tau) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) dx dy, \quad (13)$$

подразумевая, что обратное преобразование имеет вид

$$\mathbf{j}^{0,d}(\omega, \mathbf{r}_\tau) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{j}^{0,d}(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) dk_x dk_y. \quad (14)$$

Образуя корреляцию для преобразования (13), находим с использованием (5)

$$\langle j_\alpha^0(\omega, \mathbf{q}), j_\beta^0(\omega, \mathbf{q}') \rangle = (2\pi)^2 F(\omega, T) \delta_{\alpha\beta} \delta(k_x - k'_x) \delta(k_y - k'_y). \quad (15)$$

Образуя величину $\text{Re}(E_x^0(\omega, \mathbf{r})H_y^{0*}(\omega, \mathbf{r}))$, видим, что она равна нулю при $k_0^2 < q^2$, т. е. эванесцентные моды не излучают. Используя (15), имеем

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle E_x^0(\omega, \mathbf{r}), H_y^{0*}(\omega, \mathbf{r}) \rangle &= \\ &= F(\omega, T) \Theta'(\omega, T) \int_0^{\sqrt{k_x^2 + k_y^2 \leq k_0}} \frac{k_0^2 - k_x^2}{4\pi^2 \omega \epsilon_0 k_z} dk_x dk_y. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались четностью и преобразовали интеграл к положительным областям. Также мы взяли функцию $\Theta'(\omega, T) = \hbar \omega f_{BE}(\omega, T)$,



описывающую среднюю энергию тепловых осцилляторов поля. Вычисляем интеграл в полярных координатах $k_x = q \cos(\varphi)$, $k_y = q \sin(\varphi)$. Результат имеет вид $\text{Re}(E_x^0(\omega, \mathbf{r}) H_y^{0*}(\omega, \mathbf{r})) = = k_0^3 F(\omega, T) / (12\pi\omega\epsilon_0)$. Учитывая две поляризации и две стороны излучения, для полной спектральной мощности результат следует увеличить в четыре раза:

$$P(\omega) = k_0^2 F(\omega, T) \Theta'(\omega, T) / (6\pi\epsilon_0). \quad (16)$$

Удельная мощность излучения по всему спектру будет

$$P = \frac{\hbar}{3\pi^2 \epsilon_0} \int_0^\infty \frac{F(\omega, T) \Theta'(\omega, T) \omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}.$$

В соответствии с определением вектора Пойнтинга здесь мы использовали только положительные частоты.

Найдем мощность, поглощаемую единицей поверхности графенового листа. Она определяется дифракционными компонентами поверхностной плотности тока, возбуждаемыми тепловым полем:

$$\begin{aligned} P(\omega) &= \frac{\text{Re}(j_x^p E_x^{p*} + j_y^p E_y^{p*})}{2} = \\ &= \frac{\text{Re}(\sigma E_x^p E_x^{p*} + \sigma E_y^p E_y^{p*})}{2} = \\ &= \sigma' \frac{|E_x^p|^2 + |E_y^p|^2}{2}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для определения (17) рассмотрим падающую на лист графена слева ($z < 0$) под всевозможными углами E -волну

$$\begin{aligned} E_z^e(\omega, \mathbf{q}) &= A_e(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) - R_e \exp(ik_z z)), \end{aligned}$$

а также такую же H -волну

$$\begin{aligned} H_z^h(\omega, \mathbf{q}) &= A_h(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) + R_e \exp(ik_z z)). \end{aligned}$$

Прошедшие волны ($z > 0$) имеют вид

$$E_z^e = T_e A_e(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - ik_z z),$$

$$H_z^h = T_h A_h(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau - ik_z z).$$

Поперечные компоненты выражаются через продольные согласно формулам (10.50) из [9] и имеют вид:

$$\begin{aligned} E_x^{e,h} &= -q^{-2} k_z k_x A_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) + R_{e,h} \exp(ik_z z)), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_y^{e,h} &= -q^{-2} k_z k_y A_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) + R_{e,h} \exp(ik_z z)), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_x^{e,h} &= \omega\epsilon_0 q^{-2} k_y A_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) - R_{e,h} \exp(ik_z z)), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_y^{e,h} &= -\omega\epsilon_0 q^{-2} k_x A_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) - R_{e,h} \exp(ik_z z)). \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau = xk_y + k_y y$. Прошедшие волны отличаются тем, что множители $\exp(-ik_z z) \pm \pm R_{e,h} \exp(ik_z z)$ следует заменить на $T_{e,h} \exp(-ik_z z)$. Сшивая электрические поля, находим связь коэффициентов отражения и прохождения $1 + + R_{e,h} = T_{e,h}$. Сшивая магнитные поля, имеем $j_x^d = \sigma_{xx} E_x = H_y^- - H_y^+$, $j_y^d = \sigma_{yy} E_y = H_x^+ - H_x^-$. Эти уравнения запишем в виде

$$\begin{aligned} j_x^d \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) &= -\frac{\omega\epsilon_0 k_x}{q^2} A_e(\omega, \mathbf{q}) (1 - R_e - T_e) - \\ &- \frac{k_z k_y}{q^2} A_h(\omega, \mathbf{q}) (1 - R_h - T_h), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j_y^d \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) &= -\frac{\omega\epsilon_0 k_y}{q^2} A_e(\omega, \mathbf{q}) (1 - R_e - T_e) + \\ &+ \frac{k_z k_x}{q^2} A_h(\omega, \mathbf{q}) (1 - R_h - T_h). \end{aligned}$$

Умножая первое на k_x , второе на k_y и складывая, получаем

$$\begin{aligned} (j_x^d k_x + j_y^d k_y) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) &= \\ &= -\omega\epsilon_0 A_e(\omega, \mathbf{q}) (1 - R_e - T_e). \end{aligned}$$

Аналогично умножая первое на k_y , а второе на k_x и вычитая, получаем

$$\begin{aligned} (j_y^d k_x - j_x^d k_y) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) &= \\ &= k_z A_h(\omega, \mathbf{q}) (1 - R_h - T_h). \end{aligned}$$

Их этих уравнений находим

$$R_e(\omega, \mathbf{q}) = \frac{j_x^d k_x + j_y^d k_y}{2\omega\epsilon_0 A_e(\omega, \mathbf{q})} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau), \quad (18)$$

$$R_h(\omega, \mathbf{q}) = \frac{j_y^d k_x - j_x^d k_y}{2k_z A_h A_e(\omega, \mathbf{q})} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau). \quad (19)$$

С другой стороны, обозначая $Z_e = k_z / (\omega\epsilon_0)$ и $Z_h = = \omega\mu_0 / k_z$, имеем

$$\begin{aligned} E_x^{e,h} &= E_{0x}^{e,h} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\ &\times (\exp(-ik_z z) + R_{e,h} \exp(ik_z z)), \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 H_y^{e,h} &= \frac{E_{0x}^{e,h}}{Z_{e,h}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\
 &\times (\exp(-ik_z z) - R_{e,h} \exp(ik_z z)), \\
 E_y^{e,h} &= E_{0y}^{e,h} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\
 &\times (\exp(-ik_z z) + R_{e,h} \exp(ik_z z)), \\
 H_x^{e,h} &= -\frac{E_{0y}^{e,h}}{Z_{e,h}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\tau) \times \\
 &\times (\exp(-ik_z z) - R_{e,h} \exp(ik_z z)),
 \end{aligned}$$

где $E_{0x}^e = -q^{-2}k_z k_x A_e(\omega, \mathbf{q})$, $E_{0y}^e = -q^{-2}k_z k_y A_e(\omega, \mathbf{q})$, $E_{0x}^h = -\omega\mu_0 q^{-2}k_y A_h(\omega, \mathbf{q})$, $E_{0y}^h = \omega\mu_0 q^{-2}k_x A_h(\omega, \mathbf{q})$. В силу независимости E - и H -полей и двух поляризаций можно рассматривать уравнения независимо, при этом коэффициенты отражения и прохождения выражаются через проводимость в виде

$$R_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{\sigma(\omega)}{2Y_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) + \sigma(\omega)}, \quad (20)$$

$$T_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{2Y_{e,h}(\omega, \mathbf{q})}{2Y_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) + \sigma(\omega)}. \quad (21)$$

Здесь $Y_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) = Z_{e,h}^{-1}(\omega, \mathbf{q})$. Это, в частности, видно из того, что матрица передачи 4×4 листа графена, связывающая компоненты $(E_x, H_y, -E_y, H_x)$ слева и справа от него, имеет блочно-диагональный вид

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} \hat{a} & 0 \\ 0 & \hat{a} \end{bmatrix}$$

с матрицей

$$\hat{a} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \sigma & 1 \end{bmatrix}$$

на главной диагонали. Это обеспечивает связи $E_x^- = E_x^+$, $H_y^- = \sigma E_x^+ + H_y^+$, $-E_y^- = -E_y^+$, $H_x^- = -\sigma E_y^+ + H_x^+$, которые с учетом $\sigma E_x^+ = \sigma E_x = j_x^d$ и $\sigma E_y^+ = \sigma E_y = j_y^d$ выражают граничные условия, причем независимо для E - и H -волн. Тензорная проводимость (учет пространственной дисперсии) приводит к смешиванию мод и поляризаций. Имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
 E_x^e H_y^{e*} &= \omega \epsilon_0 k_z k_x^2 |A_e(\omega, \mathbf{q})/q|^2, \\
 -E_y^e H_x^{e*} &= \omega \epsilon_0 k_z k_y^2 |A_e(\omega, \mathbf{q})/q|^2, \\
 E_x^h H_y^{h*} &= \omega \mu_0 k_z k_y^2 |A_h(\omega, \mathbf{q})/q|^2, \\
 -E_y^h H_x^{h*} &= \omega \mu_0 k_z k_x^2 |A_h(\omega, \mathbf{q})/q|^2,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_x^e H_y^{h*} &= k_z^2 k_x k_y A_e(\omega, \mathbf{q}) A_h^*(\omega, \mathbf{q})/q^2, \\
 E_x^h H_y^{e*} &= \omega^2 \mu_0 \epsilon_0 k_x k_y A_h(\omega, \mathbf{q}) A_e^*(\omega, \mathbf{q})/q^2, \\
 -E_y^e H_x^{h*} &= -k_z^2 k_x k_y A_e(\omega, \mathbf{q}) A_h^*(\omega, \mathbf{q})/q^2, \\
 -E_y^h H_x^{e*} &= -\omega^2 \mu_0 \epsilon_0 k_y k_x A_h(\omega, \mathbf{q}) A_e^*(\omega, \mathbf{q})/q^2.
 \end{aligned}$$

Из них следует

$$2S_z(\omega, \mathbf{q}) = \omega k_z q^{-2} (\epsilon_0 |A_e(\omega, \mathbf{q})|^2 + \mu_0 |A_h(\omega, \mathbf{q})|^2).$$

Считая излучение изотропным, положим $A_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) = (q/k_0) A_{e,h}(\omega)$. Заметим, что выбор спектральных амплитуд в некотором смысле произволен. Такой выбор амплитуд позволяет учесть и случай T -волн, причем результат можно обратить по Фурье. Действительно, для T -волны $q = 0$, $A_{e,h}(\omega, \mathbf{q}) = 0$, $E_z = E_z = 0$. При $k_y = 0$ и при раскрытии неопределенностей типа k_x/q , например, при $k_x \rightarrow 0$, имеем $k_x/q \rightarrow 1$. При раскрытии такой же неопределенности при $k_x = k_y \rightarrow 0$ имеем $k_x/q \rightarrow 1/\sqrt{2}$. Мощность, переносимая такой T -волной, являющейся предельным случаем E -волны, в два раза меньше, но следует учесть еще и вклад от волны другой поляризации, а также такой же вклад от предельного случая для H -волны. Интегрируя $2S_z(\omega, \mathbf{q})$ по k_x и k_y , найдем

$$2S_z(\omega) = \frac{\pi^2 \omega^2}{2} (\epsilon_0 |A_e(\omega)|^2 + \mu_0 |A_h(\omega)|^2).$$

Поток изотропного излучения вдоль оси z есть

$$S_z(\omega, T) = \frac{u'(\omega, T)}{6} = f_{BE}(\omega, T) \frac{\hbar \omega^3}{6\pi^2 c^2}.$$

Отсюда получаем $(\epsilon_0 |A_e(\omega)|^2 + \mu_0 |A_h(\omega)|^2) = f_{BE}(\omega, T) 2\hbar\omega / (3\pi^4 c)$. Для листа графена имеем

$$\begin{aligned}
 |E_x^e + E_x^h|^2 &= \frac{1}{q^2 k_0^2} \left| k_z k_x \frac{2Y_e(\omega, \mathbf{q}) A_e(\omega)}{2Y_e(\omega, \mathbf{q}) + \sigma(\omega)} + \right. \\
 &= \omega \mu_0 k_y \frac{2Y_h(\omega, \mathbf{q}) A_h(\omega)}{2Y_h(\omega, \mathbf{q}) + \sigma(\omega)} \left. \right|^2.
 \end{aligned}$$

Это выражение преобразуется к виду

$$\frac{4k_z^2}{q^2} \left| \frac{k_x A_e(\omega)}{2k_0 + k_z \xi(\omega)} + \frac{k_y Z_0 A_h(\omega)}{2k_z + k_0 \xi(\omega)} \right|^2.$$

Полагая, что вклады в излучение от E -волн и H -волн одинаковые, т. е. $A_e(\omega) = Z_0 A_h(\omega)$, будем иметь

$$\begin{aligned}
 |E_x^e + E_x^h|^2 &= \frac{4k_z^2 |A_e(\omega)|^2}{q^2} \times \\
 &\times \left| \frac{k_x}{2k_0 + k_z \xi(\omega)} + \frac{k_y}{2k_z + k_0 \xi(\omega)} \right|^2. \quad (22)
 \end{aligned}$$



Точно также

$$|E_y^e + E_y^h|^2 = \frac{4k_z^2 |A_e(\omega)|^2}{q^2} \times \left| \frac{k_y}{2k_0 + k_z \xi(\omega)} + \frac{k_x}{2k_z + k_0 \xi(\omega)} \right|^2. \quad (23)$$

При интегрировании (22) и (23) по k_x и k_y члены с произведениями $k_x k_y$ обнуляются и остаются члены с k_x^2 и k_y^2 . В результате надо вычислять интегралы типа

$$I_e(\omega, \xi) = \int_{q^2 \leq k_0^2} \frac{k_z^2 k_x^2}{q^2 |2k_0 + k_z \xi(\omega)|^2} dk_x dk_y,$$

$$I_h(\omega, \xi) = \int_{q^2 \leq k_0^2} \frac{k_z^2 k_y^2}{q^2 |2k_z + k_0 \xi(\omega)|^2} dk_x dk_y$$

и такие же интегралы $I'_{1,2}$, где произведена замена $k_x \leftrightarrow k_y$. Очевидно, $I'_{1,2} = I_{1,2}$. Вычисляем их в полярной системе координат:

$$I_e(\omega, \xi) = \int_{q^2 \leq k_0^2} \frac{(k_0^2 - q^2) \cos^2 \varphi}{|2k_0 + \sqrt{k_0^2 - q^2} \xi(\omega)|^2} q dq d\varphi = \pi \int_0^{k_0} \frac{u^2 q dq}{4k_0^2 + 4k_0 u \xi'(\omega) + u^2 |\xi(\omega)|^2}.$$

Здесь $u = k_z = \sqrt{k_0^2 - q^2}$. Делая замену переменных $q = \sqrt{u^2 - k_0^2}$, получаем

$$I_e(\omega, \xi) = \pi \int_0^{k_0} \frac{u^3 du}{4k_0^2 + 4k_0 u \xi'(\omega) + u^2 |\xi(\omega)|^2}.$$

Этот интеграл вычисляется с использованием интегралов

$$I_e^n(\omega, \xi) = \int_0^{k_0} \frac{u^n du}{4k_0^2 + 4k_0 u \xi'(\omega) + u^2 |\xi(\omega)|^2},$$

$$I_e^0(\omega, \xi) = \frac{1}{2k_0 |\xi''(\omega)|} \left[\arctan \left(\frac{|\xi(\omega)|^2 + 2\xi'(\omega)}{2|\xi''(\omega)|} \right) - \arctan \left(\frac{\xi'(\omega)}{|\xi''(\omega)|} \right) \right],$$

$$I_e^1(\omega, \xi) = \frac{1}{2|\xi(\omega)|^2} \ln \left(1 + \xi'(\omega) + \frac{|\xi(\omega)|^2}{4} \right) - \frac{2k_0 \xi'(\omega)}{|\xi(\omega)|^2} I_e^0(\omega, \xi),$$

$$I_e^2(\omega, \xi) = \frac{k_0}{|\xi(\omega)|^2} -$$

$$- \frac{2k_0 \xi'(\omega)}{|\xi(\omega)|^4} \ln \left(1 + \xi'(\omega) + \frac{|\xi(\omega)|^2}{4} \right) + \frac{4k_0 (\xi'^2(\omega) - \xi''^2(\omega))}{|\xi(\omega)|^4} I_e^0(\omega, \xi).$$

Результат имеет вид

$$I_e(\omega, \xi) = \frac{\pi k_0^2}{2|\xi(\omega)|^2} - \frac{4\pi k_0^2}{|\xi(\omega)|^2} I_e^1(\omega, \xi) - \frac{4\pi k_0 \xi'(\omega)}{|\xi(\omega)|^2} I_e^2(\omega, \xi). \quad (24)$$

Для второго интеграла

$$I_h(\omega, \xi) = \pi \int_0^{k_0} \frac{u^3 du}{4u^2 + 4uk_0 \xi'(\omega) + k_0^2 |\xi(\omega)|^2},$$

$$I_h^0(\omega, \xi) = \frac{1}{2k_0 |\xi''(\omega)|} \left[\arctan \left(\frac{2 + \xi'(\omega)}{|\xi''(\omega)|} \right) - \arctan \left(\frac{\xi'(\omega)}{|\xi''(\omega)|} \right) \right],$$

$$I_h^1(\omega, \xi) = \frac{1}{8} \ln \left(\frac{4 + 4\xi'(\omega) + |\xi(\omega)|^2}{|\xi(\omega)|^2} \right) - \frac{\xi'(\omega)}{2} k_0 I_h^0(\omega, \xi),$$

$$I_h^2(\omega, \xi) = \frac{k_0}{4} \left[1 - \frac{\xi'(\omega)}{2} \ln \left(\frac{4 + 4\xi'(\omega) + |\xi(\omega)|^2}{|\xi(\omega)|^2} \right) + (\xi'^2(\omega) - \xi''^2(\omega)) k_0 I_h^0(\omega, \xi) \right],$$

и имеем результат

$$I_h(\omega, \xi) = \frac{\pi k_0^2}{4} \left[\frac{1}{2} - |\xi(\omega)|^2 I_h^1(\omega, \xi) - 4\xi'(\omega) \frac{I_h^2(\omega, \xi)}{k_0} \right]. \quad (25)$$

Видим, что спектральная мощность потерь (17) сложным образом выражается через нормированную проводимость графена в виде

$$P(\omega) = 4\hbar \omega \xi'(\omega) f_{BE}(\omega, T) \frac{|I_e(\omega, \xi) + I_h(\omega, \xi)|}{3\pi^4}. \quad (26)$$

Здесь мы учли тождество $Z_0 \varepsilon_0 c = 1$. Теперь полная плотность мощности потерь есть

$$\tilde{P} = \int_0^\infty P(\omega) d\omega.$$



Сравнивая с (16), имеем

$$F(\omega, T) = 8 \varepsilon_0 \xi'(\omega) |I_e(\omega, \xi) + I_h(\omega, \xi)| / (\pi^3 k_0^2). \quad (27)$$

Величина (27) имеет размерность проводимости. Ее можно записать в следующем виде: $F(\omega, T) = 8 \varepsilon_0 \xi'(\omega) \Phi(\xi'(\omega), \xi''(\omega)) / \pi^3$, где безразмерная положительная функция $\Phi(\xi'(\omega), \xi''(\omega))$ получена выделением из интегралов множителя k_0^2 и сокращения на него:

$$\Phi(\xi'(\omega), \xi''(\omega)) = |I_e(\omega, \xi) + I_h(\omega, \xi)| / k_0^2.$$

Она имеет достаточно сложный вид.

Рассмотрим частный предельный случай отсутствия реактивных свойств $\xi'' = 0$:

$$I_e(\omega, \xi) = \frac{1}{\xi'^4} \left(\frac{\xi'^2(\omega) + 4\xi'(\omega)}{2} - 6\xi'(\omega) + 12 \ln(1 + \xi'(\omega)/2) + \frac{8}{\xi'(\omega) + 2} - 4 \right),$$

$$I_h(\omega, \xi) = \frac{1}{16} \left(25\xi'(\omega) + 3\xi'^2(\omega) \ln\left(1 + \frac{2}{\xi'(\omega)}\right) + \frac{\xi'^3(\omega)}{2 + \xi'(\omega)} - \xi'^2(\omega) \right).$$

Эти соотношения упрощаются, если диссипация мала $\xi' \ll 1$. В этом случае $I_h(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 / 8$, $I_e(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 / (2\xi'^2(\omega))$ и функция $\Phi(\xi'(\omega), 0) \approx \pi / (2\xi'^2(\omega))$ большая. Если же диссипация большая ($\xi' \gg 1$), то $I_e(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 / (2\xi'^2(\omega))$, $I_h(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 (2 - \xi'(\omega)) / 16$, и функция $\Phi(\xi'(\omega), 0) \approx \pi \xi' / 16$ также большая.

В другом частном случае отсутствия диссипации $\xi'(\omega) = 0$ получаем

$$I_e(\omega, \xi) = \frac{1}{\pi k_0^2} = \frac{1}{2\xi''^2(\omega)} - \frac{2}{\xi''^4(\omega)} \ln\left(1 + \frac{\xi''^2(\omega)}{4}\right),$$

$$I_h(\omega, \xi) = \frac{1}{\pi k_0^2} = \frac{1}{8} - \frac{\xi''^2(\omega)}{32} \ln\left(1 + \frac{4}{\xi''^2(\omega)}\right).$$

Соотношения упрощаются, если реактивность мала ($\xi''^2(\omega) \ll 1$): $I_e(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 / 16$, $I_h(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 / 8$, т. е. функция становится постоянной $\Phi(0, \xi''(\omega)) \approx 3\pi / 16$. В случае большой реактивности ($\xi''^2(\omega) \gg 1$)

$$I_e(\omega, \xi) = \frac{1}{\pi k_0^2} \approx \frac{1}{2\xi''^2(\omega)} - \frac{4}{\xi''^4(\omega)} \ln\left(\frac{\xi''(\omega)}{2}\right) \approx \frac{1}{2\xi''^2(\omega)},$$

$$I_h(\omega, \xi) \approx \frac{1}{\pi k_0^2} \approx \frac{1}{4\xi''^2(\omega)},$$

и функция $\Phi(0, \xi''(\omega)) \approx 3\pi / (4\xi''^2(\omega))$ мала. В предположении, что проводимость описывается моделью Друде

$$\xi(\omega) = \xi'(\omega) + i\xi''(\omega) = \frac{\xi(0)}{1 + i\omega/\omega_c}, \quad (28)$$

оценим результаты при больших частотах, когда $|\xi(\omega)|^2 \approx \xi''^2(\omega)$, $\xi'(\omega) \approx |\xi(\omega)|^2 / \xi_0$, $\xi''(\omega) \approx -\xi_0 \omega_c / \omega$. Мы обозначили константу $\xi(0) = \xi_0$. В этом случае все величины малы, $|\xi(\omega)|^2$ и $\xi'(\omega)$ одного порядка малости, а $\xi''(\omega)$ отрицательная и существенно превосходит их по модулю: $|\xi(\omega)|^2 = \xi''^2(\omega) = \xi_0 \xi'(\omega)$. Имеем соотношения:

$$I_e^0(\omega, \xi) = \frac{1}{2k_0} \left(\frac{1}{2} - \frac{|\xi(\omega)|^2}{3} \left(\frac{1}{8} + \frac{3}{4\xi_0} + \frac{3}{2\xi_0^2} \right) \right),$$

$$I_h^0(\omega, \xi) = \frac{1}{2k_0} \left(\frac{\pi}{2|\xi(\omega)|} - \frac{1}{\xi_0} \right),$$

$$I_e^1(\omega, \xi) = \frac{1}{8} - \frac{|\xi(\omega)|^2}{4} \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{1}{4} \right)^2,$$

$$I_h^1(\omega, \xi) = \frac{|\xi(\omega)|^2}{8} \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{4} \ln\left(\frac{2}{|\xi(\omega)|}\right) - \frac{1}{4\xi_0} \left(\frac{\pi|\xi(\omega)|}{2} - \frac{|\xi(\omega)|^2}{\xi_0} \right),$$

$$I_e^2(\omega, \xi) = -\frac{2}{\xi_0} \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{1}{4} \right) \left(1 - \frac{|\xi(\omega)|^2}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{1}{4} \right) \right) + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{8} + \frac{3}{4\xi_0} + \frac{3}{2\xi_0^2} \right) + \frac{1}{\xi_0^2} \left(1 - \frac{2|\xi(\omega)|^2}{3} \left(\frac{1}{8} + \frac{3}{4\xi_0} + \frac{3}{2\xi_0^2} \right) \right),$$

$$\frac{I_h^2(\omega, \xi)}{k_0} = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{|\xi(\omega)|^2}{2\xi_0} \left(\frac{|\xi(\omega)|^2}{\xi_0} + \frac{|\xi(\omega)|^2}{4} - 2 \ln\left(\frac{2}{|\xi(\omega)|}\right) \right) + \frac{|\xi(\omega)|}{2} \left(\frac{|\xi(\omega)|^2}{\xi_0^2} - 1 \right) \left(\frac{\pi}{2} - \frac{|\xi(\omega)|}{\xi_0} \right) \right],$$



$$\frac{I_e(\omega, \xi)}{\pi k_0^2} = \frac{1}{2|\xi(\omega)|^2} - \frac{4}{|\xi(\omega)|^2} I_e^1(\omega, \xi) - \frac{4}{\xi_0} \frac{I_e^2(\omega, \xi)}{k_0},$$

$$\frac{I_h(\omega, \xi)}{\pi k_0^2} = \frac{1}{8} - \frac{|\xi(\omega)|^2}{4} I_h^1(\omega, \xi) - \frac{|\xi(\omega)|^2}{\xi_0} \frac{I_h^2(\omega, \xi)}{k_0}.$$

В рассмотренном пределе они упрощаются: $I_e^2(\omega, \xi) \approx k_0/12$, $I_h^2(\omega, \xi) \approx k_0/4$, $I_e^1(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2 (\xi_0^{-2} + \xi_0^{-1}/6 + 1/16)$, $I_h^1(\omega, \xi) \approx \pi k_0^2/8$, $\Phi(\xi', \xi'') \approx \pi (\xi_0^{-2} + \xi_0^{-1}/6 + 3/16)$. В случае $\xi_0 \ll 1$ (что обычно имеет место для графена) $\Phi(\xi', \xi') \approx \pi/\xi_0^2$, и при больших частотах имеем $F(\omega, T) = 8 \varepsilon_0 \xi_0^{-1} \omega^2 / (\omega \pi)^2$.

Модель Друде предполагает постоянство частоты столкновений. Однако при больших энергиях кванта поглощение падает, а частота столкновений уменьшается. На таких частотах модель макроскопической проводимости теряет смысл. В этом случае происходит фотоионизация отдельных атомов углерода. При таких частотах средняя энергия осцилляторов поля $\Theta(\omega, T) = (\hbar\omega/2) \coth(\hbar\omega/(2k_B T))$, взаимодействующих с веществом, также теряет смысл (см. [1, стр. 17–18]). При частотах с энергией квантов в десятки ЭВ все шесть электронов атома углерода можно считать свободными, однако в таком поле с ростом частоты они колеблются во все меньшей области около атома, т. е. вероятность их рассеяния падает. Это оправдывает введение модели 2D плазменного листа с проводимостью

$$\sigma(\omega) = \frac{Ne^2}{m_e \omega_c (1 + i\omega/\omega_c(\omega))}. \quad (29)$$

Здесь $N = 2.3 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-2}$ – поверхностная плотность всех электронов в графене. Считая вклад на высоких частотах малым, можно рассматривать ограниченный спектр частот. Для исследования вопроса о сходимости интегралов полезно вводить разные модели. Например, можно считать величину ξ_0 зависящей от частоты. Модель (29) можно рассматривать как модель (28), у которой два параметра ξ_0 и ω зависят от частоты. Рассмотрим модель Друде (28) с одним частотно зависимым параметром: частотой столкновений $\omega(\omega) = \omega(0) / (1 + (\omega/\Omega)^\alpha)$, где Ω – некая характерная частота. Для графена ее можно взять в виде $\Omega = \gamma_0/\hbar$, $\gamma_0 = 2.8 \text{ эВ}$ – энергия связи [4, 5, 10]. В этом случае на больших частотах $F(\omega, T) \sim \omega^{-2(1+\alpha)}$, $F(\omega, T) \Theta(\omega, T) \sim \omega^{-(1+2\alpha)}$, что обеспечивает сходимость спектральных интегралов при вычислении корреляций.

2. Корреляции, теплопередача и дисперсионные силы между листами графена

Показано, что корреляционные соотношения для флуктуационных поверхностных токов в листе графена определяются не реальной частью поверхностной проводимости, как можно было предположить исходя из корреляционных соотношений для бесконечной 3D среды [1] и связи диэлектрической проницаемости с поверхностной проводимостью, а функцией $F(\omega, T)$ (27), имеющей размерность проводимости, в которую входят коэффициенты отражения E - и H -мод в виде $1 + R_{e,h}(\omega, \mathbf{q})$ или соответствующие им импедансы. Указанные коэффициенты приведены для пространственно-спектральных амплитуд, поэтому получение корреляционных соотношений в пространственной области требует обращения интегралов. Заметим, что в окончательные формулы работы [7] вошла не введенная в корреляционные соотношения бесконечной среды диссипация $\varepsilon''(\omega)$ (формула (1.2)), а импедансы $Z_e(\omega, q) = \sqrt{k_0^2 \varepsilon - q^2} / (k_0 \varepsilon)$, $Z_{0e}(\omega, q) = \sqrt{k_0^2 - q^2} / k_0$, $Z_h(\omega, q) = k_0 / \sqrt{k_0^2 \varepsilon - q^2}$, $Z_{0h}(\omega, q) = k_0 / \sqrt{k_0^2 - q^2}$ и связанные с ними коэффициенты отражения (для простоты предполагаем полупространства одинаковыми):

$$R_e(\omega, q) = \frac{Z_{0e}(\omega, q) - Z_e(\omega, q)}{Z_{0e}(\omega, q) + Z_e(\omega, q)} =$$

$$= \frac{\varepsilon \sqrt{k_0^2 - q^2} - \sqrt{k_0^2 \varepsilon - q^2}}{\varepsilon \sqrt{k_0^2 - q^2} + \sqrt{k_0^2 \varepsilon - q^2}},$$

$$R_h(\omega, q) = \frac{Z_{0h}(\omega, q) - Z_h(\omega, q)}{Z_{0h}(\omega, q) + Z_h(\omega, q)} =$$

$$= \frac{\sqrt{k_0^2 \varepsilon - q^2} - \sqrt{k_0^2 - q^2}}{\sqrt{k_0^2 \varepsilon - q^2} + \sqrt{k_0^2 - q^2}}.$$

Поскольку имеется бесконечная серия отражений от двух границ, указанные величины входят как суммы

$$\frac{R_{e,h}^2(\omega, q) \exp(-2id\sqrt{k_0^2 - q^2})}{1 - R_{e,h}^2(\omega, q) \exp(-2id\sqrt{k_0^2 - q^2})}.$$



Соответствующие величины следует образовывать при анализе корреляционных взаимодействий в листах графена. Для двух листов также следует определять излученную и поглощенную мощности при условии некоррелированности флуктуаций на разных листах. Для графена удобнее использовать проводимости. Коэффициенты отражения при падении на два листа, разделенные дистанцией d , имеют вид

$$R_{e,h}(\omega, q, d) = \frac{-\sigma(2Y_{e,h} + i\sigma \tan(k_z d))}{2iY_{e,h}^2 \tan(k_z d) + i\sigma(2Y_{e,h} + \sigma) \tan(k_z d) + 2Y_{e,h}(\sigma + Y_{e,h})} \quad (30)$$

Считая, что при $d = 0$ проводимости листов складываются, из (30) имеем $R_{e,h}(\omega, q, d) = -\sigma / (Y_{e,h} + \sigma)$. Определяя аналогично $T_{e,h}(\omega, q, d)$, можно найти диссипацию, вычисляя баланс $1 - |R_{e,h}(\omega, q, d)|^2 - |T_{e,h}(\omega, q, d)|^2$. Другой способ определения диссипации состоит в вычислении дифракционных токов и величин $\mathbf{j}^d \mathbf{E}^*$. Для графена при $T \rightarrow 0$ и условии $\omega_c \rightarrow 0$ имеем

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{4\pi\hbar} + \frac{e^2 \mu_c}{\pi\hbar^2 (\omega_c + i\omega)} = \frac{e^2}{4\pi\hbar} + \frac{e^2 \mu_c (\omega_c - i\omega)}{\pi\hbar^2 (\omega_c^2 + \omega^2)},$$

и в этом случае

$$\sigma'(\omega) \approx \frac{e^2}{4\pi\hbar} + \frac{e^2 \mu_c}{\hbar^2} \delta(\omega), \quad \sigma''(\omega) = -\frac{e^2 \mu_c}{\pi\hbar^2 \omega}.$$

Однако этот случай возможен только для чистого графена, т. е. при $\mu_c \rightarrow 0$.

3. Результаты

В случае если два листа графена находятся при разных температурах T_1 и T_2 на некотором расстоянии друг от друга, теплопередачу между более нагретым и менее нагретым листами можно получить согласно методу работы [11]. При этом следует вычислять вектор Пойнтинга каждого из листов при своей температуре и поглощение каждым из листов, а затем определять разность поглощенных мощностей. В качестве корреляций поверхностной плотности токов в первом приближении берем равновесные корреляции при заданных температурах.

На рис. 1 представлены результаты вычисления спектральной плотности излучения листа графена при разных температурах. На рис. 2 дана удельная взаимная спектральная передача тепла между двумя листами в ближней зоне. Это соответствует тому, что для всех частот излучения

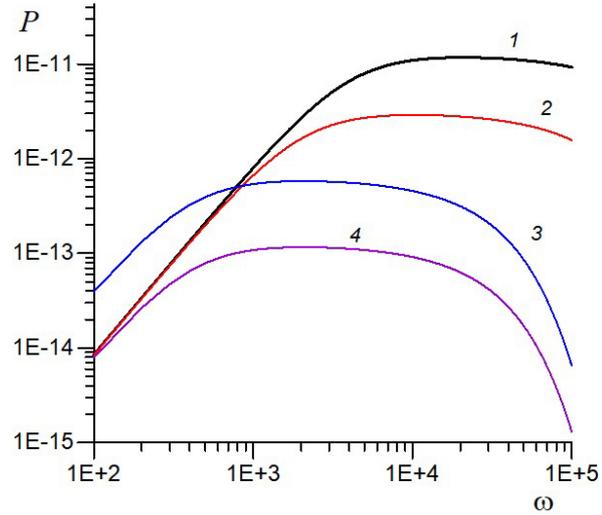


Рис. 1. Спектральная плотность излучения листа графена ($\text{Дж}/\text{м}^2$) при $\mu_c = 0.1$ эВ (кривые 1, 2, 3) и $\mu_c = 0.5$ эВ (4) при температуре $T = 300$ К (кривая 1), 150 К (2) и 30 К (3, 4)

Fig. 1. Radiation spectral density of a graphene sheet (J/m^2) at $\mu_c = 0.1$ eV (curves 1, 2, 3) and $\mu_c = 0.5$ eV (4) at temperature $T = 300$ K (curve 1), 150 K (2) and 30 K (3, 4)

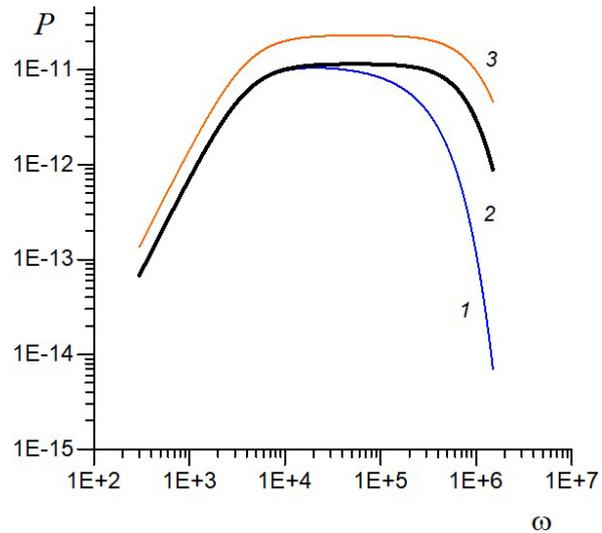


Рис. 2. Спектральная плотность радиационной теплопередачи ($\text{Дж}/\text{м}^2$) от листа графена с температурой $T = 300$ К к листу с температурой 100 К (кривая 1), 600 К (2) и 900 К (3) при $\mu_c = 0.5$ эВ, $d = 100$ нм

Fig. 2. Radiation heat transfer spectral density (J/m^2) from a graphene sheet with temperature $T = 300$ K to a sheet with temperature 100 K (curve 1), 600 K (2) and 900 K (3) at $\mu_c = 0.5$ eV, $d = 100$ nm

должно выполняться $\omega \ll c/d$, т. е. запаздыванием и взаимным переизлучением можно пренебречь. Для получения полных плотностей указанные величины следует интегрировать по частоте. Основной вклад вносят достаточно низкие частоты. На высоких частотах и особенно в оптике графен является весьма прозрачным. Полученные соотношения соответствуют



модельной задаче о бесконечных листах графена в вакууме. Реально в структурах могут присутствовать графеновые листы конечных размеров в виде чешуек, лент и других графеновых элементов. Такие элементы являются частями широко используемого материала – стеклоуглерода [12]. Для них возникают граничные условия для тока, что приводит к несколько более сложным результатам, требующим определения такого тока [13]. Для выращенного на диэлектрических подложках эпитаксиального графена излучение и поглощение 3D подложки на порядки превалирует над такими же параметрами 2D графена, чем и объясняется отдельное рассмотрение их для графена. В случае конечных графеновых элементов с поперечными размерами, превышающими расстояние между ними, полученные результаты для удельных плотностей можно применять с учетом площадей рассматриваемых структур. При расчетах использовалась зависимость частоты столкновений от температуры из [6]. Реально теплообмен неравновесный и нестационарный, что приводит к выравниванию температур. Учет нестационарности возможен, но требует интегрирования балансных уравнений во времени.

Заключение

Из принципа детального равновесия получены корреляционные соотношения для листа графена в тепловом поле. Показано, что основной вклад вносят низкочастотные флуктуации. Соотношения можно использовать для определения дисперсионных сил между листами графена в ближней и дальней волновых зонах. В ближней зоне запаздывания можно не учитывать, что определяет соответствующие характерные частоты. Для металлов и диэлектриков имеет место термическая длина $l_T = \hbar c / (2k_B T)$, на которой проявляется температурный эффект. Для комнатной температуры $l_T \sim 8$ мкм. Для графена указанный эффект проявляется на гораздо меньших дистанциях (порядка 150 нм) [14]. В случае взаимодействия графеновых фрагментов расстояние между ними должно быть существенно меньше их поперечных размеров. В противном случае следует решать электродинамическую задачу определения распределения на них плотности тока с учетом для нее граничных условий на краях фрагментов. В этом случае наряду с флуктуационными плотностями поверхностных токов следует вводить наведенные дифракционные плотности и определять их связи с корреляционными. Дифракционные плотности

связаны с многократными переотражениями взаимодействующих объектов и фактически определяют функцию Грина всей структуры. Полное поле есть сумма воздействий обоих плотностей тока. Рассматривая два таких взаимодействующих объекта в равновесии с тепловым полем, также можно получить корреляционные соотношения. В этом случае их можно непосредственно использовать для определения дисперсионных сил.

Список литературы

1. Левин М. Л., Рытов С. М. Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике. М.: Наука, 1967. 308 с.
2. Gusynin V. P., Sharapov S. G., Carbotte J. P. Sum rules for the optical and Hall conductivity in graphene // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. Article number 165407. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.165407>
3. Фальковский Л. А. Оптические свойства графена и полупроводников типа A_4B_6 // УФН. 2008. Т. 178, № 9. С. 923–934. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0178.200809b.0923>
4. Hanson G. W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene // J. Appl. Phys. 2008. Vol. 103. Article number 064302. <https://doi.org/10.1063/1.2891452>
5. Lovat G., Hanson G. W., Araneo R., Burghignoli P. Semiclassical spatially dispersive intraband conductivity tensor and quantum capacitance of graphene // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 87. Article number 115429. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115429>
6. Волокитин А. И., Перссон Б. Н. Й. Влияние электрического тока на силы Казимира между графеновыми листами // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98, № 3. С. 165–171. <https://doi.org/10.7868/S0370274X13150058>
7. Лифшиц Е. М. Теория молекулярных сил притяжения между твердыми телами // ЖЭТФ. 1955. Т. 29, № 1. С. 94–110.
8. Марков Г. Т., Чаплин А. Ф. Возбуждение электромагнитных волн. М.: Радио и связь, 1983. 296 с.
9. Гольдштейн Л. Д., Зернов Н. В. Электромагнитные поля и волны. М.: Сов. радио, 1971. 664 с.
10. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite // Phys. Rev. 1947. Vol. 71. P. 622–634. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
11. Polder D., Van Hove M. Theory of Radiative Heat Transfer between Closely Spaced Bodies // Phys. Rev. B. 1971. Vol. 4. P. 3303–3314. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.4.3303>
12. Petrunin A. A., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Effect of Functionalization with Potassium Atoms on the Electronic Properties of a 3D Glass-like Nanomaterial Reinforced with Carbon Nanotubes: In Silico Study // J. Compos. Sci. 2022. Vol. 6, № 7. Article number 186. <https://doi.org/10.3390/jcs6070186>



13. Давидович М. В. Об обращении интегродифференциального оператора тонкой линейной наноантенны и дисперсионных силах // ЖТФ. 2022. Т. 92, вып. 10. С. 1537–1555. <https://doi.org/10.1134/S106378422207012X>
14. Bimonte G., Klimchitskaya G. L., Mostepanenko V. M. How to observe the giant thermal effect in the Casimir force for graphene systems // *Phys. Rev. A*. 2017. Vol. 96. Article number 012517. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.012517>

References

1. Levin M. L., Rytov S. M. *Teoriya ravnovesnykh teplovykh fluktuatsiy v elektrodinamike* [Theory of equilibrium thermal fluctuations in electrodynamics]. Moscow, Nauka, 1967. 308 p. (in Russian).
2. Gusynin V. P., Sharapov S. G., Carbotte J. P. Sum rules for the optical and Hall conductivity in graphene. *Phys. Rev. B*, 2007, vol. 75, article no. 165407. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.165407>
3. Falkovsky L. A. Optical properties of graphene and IV–VI semiconductors. *Physics-Uspokhi*, 2008, vol. 51, no. 9, pp. 887–897. <https://doi.org/10.1070/PU2008v051n09ABEH006625>
4. Hanson G. W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *J. Appl. Phys.*, 2008, vol. 103, article no. 064302. <https://doi.org/10.1063/1.2891452>
5. Lovat G., Hanson G. W., Araneo R., Burghignoli P. Semiclassical spatially dispersive intraband conductivity tensor and quantum capacitance of graphene. *Phys. Rev. B*, 2013, vol. 87, article no. 115429. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115429>
6. Volokitin A. I., Persson B. N. J. Effect of the electric current on the Casimir force between graphene sheets. *Jetp Lett.*, 2013, vol. 98, pp. 143–149. <https://doi.org/10.1134/S0021364013160145>
7. Lifshitz E. The theory of molecular attractive forces between solids. *Soviet Phys.*, 1956, vol. 2, no. 1, pp. 73–83. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-036364-6.50031-4>
8. Markov G. T., Chaplin A. F. *Vozbuzhdenie elektromagnitnykh voln* [Excitation of electromagnetic waves]. Moscow, Radio i svyaz', 1983. 296 p. (in Russian).
9. Gol'dshtejn L. D., Zernov N. V. *Elektromagnitnye polya i volny* [Electromagnetic fields and waves]. Moscow, Sov. Radio, 1971. 664 p. (in Russian).
10. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite. *Phys. Rev.*, 1947, vol. 71, pp. 622–634. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
11. Polder D., Van Hove M. Theory of Radiative Heat Transfer between Closely Spaced Bodies. *Phys. Rev. B*, 1971, vol. 4, pp. 3303–3314. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.4.3303>
12. Petrunin A. A., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Effect of Functionalization with Potassium Atoms on the Electronic Properties of a 3D Glass-like Nanomaterial Reinforced with Carbon Nanotubes: In Silico Study. *J. Compos. Sci.*, 2022, vol. 6, no. 7, article no. 186. <https://doi.org/10.3390/jcs6070186>
13. Davidovich M. V. On the Inversion of the Integrodifferential Operator of a Thin Linear Nanoantenna and Dispersion Forces. *Technical Physics*, 2022, vol. 67, pp. 468–486. <https://doi.org/10.1134/S106378422207012X>
14. Bimonte G., Klimchitskaya G. L., Mostepanenko V. M. How to observe the giant thermal effect in the Casimir force for graphene systems. *Phys. Rev. A*, 2017, vol. 96, article no. 012517. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.012517>

Поступила в редакцию 02.01.2023; одобрена после рецензирования 04.03.2023; принята к публикации 10.03.2023
The article was submitted 02.01.2023; approved after reviewing 04.03.2023; accepted for publication 10.03.2023

НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОМАТЕРИАЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 179–187
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 179–187
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-179-187>, EDN: ASRADO

Научная статья
УДК 29.19.16:29.19.22:616-77:615.4

Исследование процесса перекристаллизации микрочастиц карбоната кальция, выращенных на волокнах поликапролактона, с помощью сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции

Н. В. Короневский[✉], О. А. Иноземцева, Б. В. Сергеева, А. В. Ушаков, С. А. Сергеев

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Короневский Никита Владимирович, аспирант кафедры физики твёрдого тела, ассистент кафедры физики твёрдого тела, kaskad_94@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4441-5577>

Иноземцева Ольга Александровна, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории биомедицинской фотоакустики научного медицинского центра, inozemtsevaoa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8898-8169>

Сергеева Бэла Владимировна, аспирант кафедры физики твёрдого тела, ведущий инженер кафедры физики твёрдого тела, bsergeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7040-1895>

Ушаков Арсений Владимирович, кандидат химических наук, доцент кафедры физической химии, arsenivushakov@yaru, <https://orcid.org/0000-0003-0495-7750>

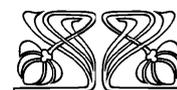
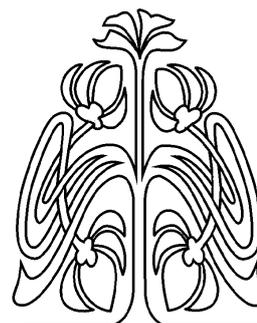
Сергеев Сергей Алексеевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твёрдого тела, ssergeev@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4442-6797>

Аннотация. Представлен метод минерализации нановолокон поликапролактона микрочастицами карбоната кальция (ватерита). Предложенный композитный материал может быть использован в качестве тканеинженерного каркаса и средства доставки лекарственных веществ для регенеративной медицины. С помощью сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции исследован процесс перекристаллизации микрочастиц ватерита, сформированных на волокнах поликапролактона, в кальцит. Проведено сравнение зависимостей массовых и количественных долей микрочастиц ватерита/кальцита от продолжительности эксперимента. Полное время перекристаллизации микрочастиц ватерита со средним диаметром 1.2 ± 0.4 мкм составляет 24 часа, а эффективное время их использования в качестве контейнера для адресной доставки лекарственных средств ограничено 18 часами.

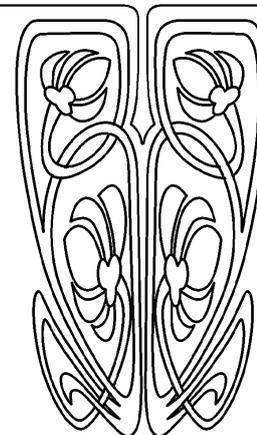
Ключевые слова: микрочастицы карбоната кальция, волокна поликапролактона, регенеративная медицина, сканирующая электронная микроскопия, рентгеновская дифракция

Благодарности: Работа выполнена при поддержке гранта в рамках реализации инновационного проекта № 17309ГУ/2022 от 04.12.2022. Авторы выражают признательность Лаборатории диагностики наноматериалов и структур, а также Центру коллективного пользования СГУ имени Н. Г. Чернышевского и лично кандидату физико-математических наук Галушка Виктору Владимировичу и Поповой Марии Андреевне за оказанную помощь при проведении данного исследования.

Для цитирования: Короневский Н. В., Иноземцева О. А., Сергеева Б. В., Ушаков А. В., Сергеев С. А. Исследование процесса перекристаллизации микрочастиц карбоната кальция, выращенных на волокнах поликапролактона, с помощью сканирующей электронной микроскопии



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





и рентгеновской дифракции // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 179–187. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-179-187>, EDN: ASRADO

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Investigation of the process of recrystallization calcium carbonate microparticles grown on polycaprolactone nanofibers using scanning electron microscopy and X-ray diffraction

N. V. Koronevskiy[✉], O. A. Inozemtseva, B. V. Sergeeva, A. V. Ushakov, S. A. Sergeev

Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Nikita V. Koronevskiy, kaskad_94@mail.ru, <https://orcid.org/000-0003-4441-5577>

Olga A. Inozemtseva, inozemtseva0a@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8898-8169>

Bela V. Sergeeva, bsergeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7040-1895>

Arseniy V. Ushakov, arsenivushakov@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0495-7750>

Sergey A. Sergeev, ssergeev@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4442-6797>

Abstract. Background and Objectives: A method for the mineralization of polycaprolactone nanofibers with microparticles of calcium carbonate (vaterite) is presented. The proposed composite material can be used as a tissue engineering scaffold and a drug delivery vehicle for regenerative medicine. **Materials and Methods:** The process of recrystallization of vaterite microparticles formed on polycaprolactone fibers into calcite is studied using scanning electron microscopy and X-ray diffraction. **Results:** The dependences of the mass and quantitative fractions of vaterite/calcite microparticles depending on the duration of the experiment have been compared. **Conclusion:** The total recrystallization time for vaterite microparticles with an average diameter of 1.2 ± 0.4 microns is 24 hours, and the effective time of their use as a container for targeted drug delivery is limited to 18 hours.

Keywords: calcium carbonate microparticles, polycaprolactone nanofibers, regenerative medicine, scanning electron microscopy, X-ray diffraction

Acknowledgements: The work was supported by a grant within the innovation project No. 17309ГУ/2022 dated 04 December 2022. The authors express their gratitude to the Laboratory of Diagnostics of Nanomaterials and Structures, as well as to the Center for Collective Use of Saratov State University and personally to Viktor V. Galushka and Maria A. Popova for their assistance in conducting the study.

For citation: Koronevskiy N. V., Inozemtseva O. A., Sergeeva B. V., Ushakov A. V., Sergeev S. A. Investigation of the process of recrystallization calcium carbonate microparticles grown on polycaprolactone nanofibers using scanning electron microscopy and X-ray diffraction. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 179–187 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-179-187>, EDN: ASRADO

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC0-BY 4.0)

Введение

Разработка новых композитных материалов является одним из приоритетных направлений развития медицинского материаловедения [1]. Сочетание таких свойств полимерной матрицы, как простота обработки и формирования, биосовместимость, биоразлагаемость [2], дополненных микро- и наноструктурированной морфологией [3], позволяет создавать новые материалы, способные инициировать регенерацию костной ткани и замещаться вновь образованной [4].

Особый интерес представляют нетканые полимерные материалы, изготовленные методом электроформования (электроспиннинга), которые структурно, химически и механически имитируют оригинальный внеклеточный матрикс и могут быть получены из широкого спектра полимеров [5]. Такие волокнистые материалы благодаря уникальным физико-химическим свойствам нашли применение в регенеративной медицине кожных покровов [6], костных тканей [7] и реконструкции хряща [8]. Были синтезированы и исследованы

композитные волокна, содержащие микрочастицы карбоната кальция (CaCO_3), а именно ватерит [9, 10]. Как правило, волокна поликапролактона используются в качестве матрицы [11, 12] и являются центрами роста для микрочастиц карбоната кальция [13, 14]. Разработанный материал может быть использован в регенеративной медицине костных и иных повреждённых тканей.

Благодаря высокой пористости и значительной площади поверхности микрочастицы ватерита обладают высокой способностью к загрузке лекарственных средств в объём микрочастиц по сравнению с адсорбцией на гладких типах поверхностей полимеров [15]. Минерализация полимерных волокон покрытием на основе пористых микрочастиц ватерита позволяет получать наноматериалы не только с улучшенной остеокондуктивностью, но и с возможностью адресной доставки лекарственных средств [16, 17]. Микрочастицы ватерита не стабильны и со временем перекристаллизуются в термодинамически стабильную полиморфную модификацию – кальцит, при этом теряя пористость структуры, вследствие



чего биологически активные вещества, заранее внедренные в поры ватеритных матриц, могут высвободиться в окружающее пространство.

Целью данного исследования было изучение процесса перекристаллизации микрочастиц ватерита, выращенных на волокнах поликапролактона, в кальцит с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и рентгеновской дифракции.

1. Материалы и методы

1.1. Материалы

Для синтеза микрочастиц CaCO_3 использовали водные растворы дигидрата хлорида кальция (CaCl_2 , Sigma-Aldrich, TESCAN, Чехия) и карбоната натрия (Na_2CO_3 , Sigma-Aldrich, TESCAN, Чехия). Для получения полимерных волокон использовали: полимер – поликапролактон ($[-(\text{CH}_2)_5-\text{CO}_2-\text{O}]_n$, с молекулярной массой 80 кДа, Sigma-Aldrich, TESCAN, Чехия), метановую кислоту (HCOOH) и этановую кислоту (CH_3COOH).

1.2. Электроформование волокон поликапролактона

Для получения волокон поликапролактона был использован метод электроформования. Раствор поликапролактона с концентрацией 10 мас.% готовили путем растворения гранул в смеси растворителей – метановой и этановой кислот (весовое соотношение 1 : 1). Для получения гомогенного прядильного раствора гранулы поликапролактона и смесь растворителя при комнатной температуре подвергали непрерывному перемешиванию в течение 2 ч. Формирование волокон проводили в течение 3 ч (приложенное напряжение 75 кВ, скорость подачи 7.8 мл/ч). Расстояние между иглой и собирающим экраном составляло 0.25 м. Нетканый материал был получен путём последовательного нанесения на подложку десяти слоёв волокон поликапролактона со средним диаметром волокон 100 ± 50 нм.

1.3. Минерализация волокон поликапролактона микрочастицами карбоната кальция

Для минерализации волокон поликапролактона микрочастицами ватерита был использован один из методов, описанных в работе [18]. Микрочастицы ватерита были синтезированы из смеси насыщенных растворов хлорида кальция (CaCl_2) и карбоната натрия (Na_2CO_3) с эквимольными концентрациями (0.5 М).

В пробирку с 1 мл раствора CaCl_2 был помещён образец волокон размером 2.5×3 см, затем пробирка подвергалась ультразвуковой обработке в течение 1 минуты. Далее в пробирку добавляли 1 мл раствора Na_2CO_3 и подвергали ультразвуковой обработке в течение 1 мин, после чего её оставляли в состоянии покоя для завершения процесса кристаллизации на 1 мин. Эксперимент проводили в ультразвуковой ванне («Сапфир», Россия) при температуре 30°C , рабочей частоте 35 кГц и интенсивности излучения 0.64 Вт/см². Затем образец извлекали из пробирки, промывали этиловым спиртом и сушили в сушильном шкафу при 45°C в течение 20–25 мин. Однородное покрытие из микрочастиц карбоната кальция на волокнах поликапролактона формировали путём трехкратного повторения стадии минерализации.

1.4. Исследование морфологии поверхности и процесса перекристаллизации сформированных на волокнах поликапролактона микрочастиц ватерита

Для исследования морфологии поверхности полученных образцов использовали сканирующую электронную микроскопию в режиме вторичных электронов (аналитический комплекс на базе растрового электронного микроскопа высокого разрешения Miра II LMU (TESCAN, Чехия), широко применяемую для визуализации объектов микромасштаба. Ускоряющее напряжение составляло 30 кВ, диаметр пучка – 3.2 нм. Для проведения исследований на образцы напыляли золотое покрытие.

Для анализа фазового состава использовался рентгеновский дифрактометр ДРОН-8Т (АО «ИЦ» Буревестник», Россия, Санкт-Петербург). Измерения рентгеновских дифрактограмм проводили «на просвет» с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения. Анализ качественного состава осуществляли с применением базы данных PDF-2 версии 2021 года. Соотношение между фазами определяли по результатам анализа рентгеновских дифрактограмм методом Ритвельда.

2. Обсуждение результатов

Полученные СЭМ изображения были обработаны с помощью программного обеспечения Image J. Для определения среднего размера сформированных микрочастиц карбоната кальция в каждом технологическом цикле (ТЦ) анализу подвергали 500 микрочастиц. На рис. 1



представлены СЭМ изображения образцов, прошедших три последовательных ТЦ. Средний диаметр сформированных микрочастиц ватерита после первого технологического цикла составил 1.5 ± 0.5 мкм, после второго – 1.0 ± 0.5 мкм, после третьего – 1.2 ± 0.4 мкм.

Для исследования процесса перекристаллизации микрочастиц CaCO_3 , выращенных на волокнах поликапролактона, из ватерита в кальцит была использована методика, представленная в работе [18]. Два одинаковых фрагмента исследуемого образца нетканого материала помещали в пробирки с деионизованной водой. Через три часа образцы извлекали из пробирок, промывали этиловым спиртом и сушили в сушильном шкафу при 45°C в течение 20–25 мин. Первый образец исследовали с помощью рентгеновской дифракции. От второго образца отделяли фрагмент и исследовали с помощью сканирующей электронной микроскопии. Процесс выдержки в воде, промывки и сушки повторяли до завершения процесса перекристаллизации, время выдерживания образцов в деионизованной воде составляло 24 часа.

На рис. 2 представлены изображения поверхности образцов композитных нетканых материалов, полученные с помощью сканирующей электронной микроскопии с начала проведения эксперимента по перекристаллизации до его полного завершения.

Для проведения количественного анализа поверхности образца на полученных СЭМ изображениях в исследуемых временных точках на каждом изображении проводился подсчет числа микрочастиц ватерита сферической формы и кальцита кубической формы относительно общего числа микрочастиц карбоната кальция, искомое отноше-

ние выражалось в процентах. Результаты анализа представлены в таблице.

К 18-му часу эксперимента большая часть микрочастиц ватерита распадалась на фрагменты размером менее 100 нм, из-за чего определение формы частиц на основе СЭМ изображений становилось невозможным, а последующий количественный анализ теряет свою надёжность и эффективность. На СЭМ изображениях для 21-го часа эксперимента видно, что поверхность исследуемых образцов композитных материалов составляют микрочастицы кальцита без включений ватерита, что указывает на завершение процесса перекристаллизации.

Для анализа качественного фазового состава регистрацию дифрактограмм проводили в интервале углов 2θ от 20 до 70 градусов. На полученных дифрактограммах наблюдали характерные пики 21.3° и 23.6° , соответствующие поликапролактону [19], 29.3° и 36° , соответствующие кальциту [20] и 32.8° , соответствующий ватериту [21].

Для исследования процесса перекристаллизации микрочастиц ватерита в кальцит и определения массовых долей соответствующих полиморфных модификаций в рассматриваемых временных точках, были получены уточнённые дифрактограммы в интервале 2θ от 27° до 37° с увеличенным временем экспозиции (рис. 3). Видно, что интенсивность пика 32.8° , соответствующего ватериту, постепенно уменьшается и к 24-му часу практически исчезает, а интенсивность пиков 29.3° и 36° , соответствующих кальциту, возрастает.

Методом Ритвельда был проведён анализ массовой доли микрочастиц ватерита/кальцита от общей массы карбоната кальция. Соотношение между фазами определяли по уточнённой

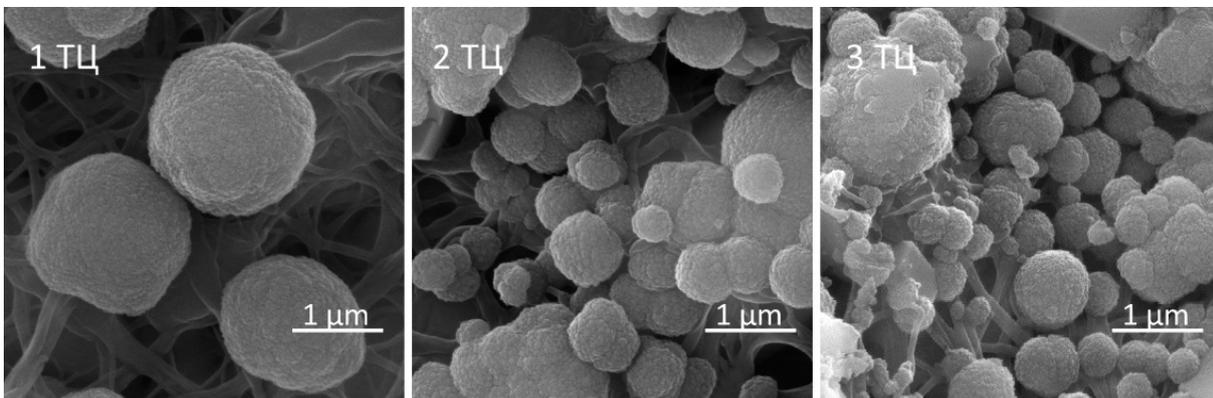


Рис. 1. СЭМ изображения полученных образцов после проведения технологических циклов с 1-го по 3-й
Fig. 1. SEM images of the obtained samples after the technological cycles from the 1st to the 3rd

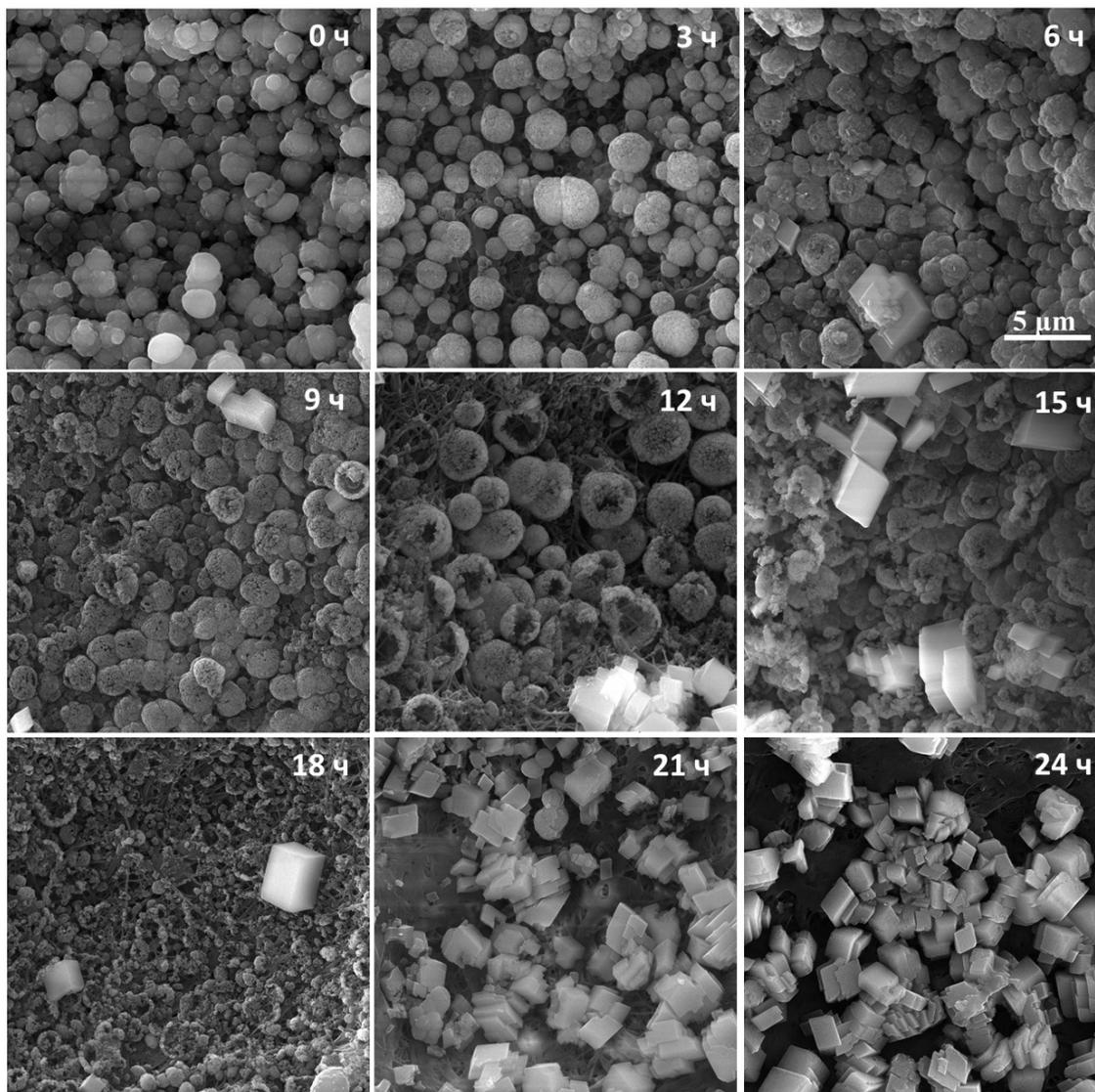


Рис. 2. СЭМ изображения поверхности синтезированных образцов композитных нетканых материалов, полученные в результате процесса перекристаллизации

Fig. 2. SEM images of the surface of synthesized samples of composite nonwovens obtained as a result of the recrystallization process

дифрактограмме (диапазон 2θ от 27° до 37°) с использованием параметров элементарных ячеек, которые предварительно оценили по полной дифрактограмме (диапазон 2θ от 20° до 70°). Результаты представлены в таблице.

На рис. 4 представлены зависимости массовых и количественных долей микрочастиц ватерита и кальцита относительно микрочастиц карбоната кальция в исследуемых временных точках.

Результаты эксперимента качественно согласуются с результатами работы [22], где представлены временные зависимости процесса перекристаллизации микрочастиц карбоната кальция из ватерита в кальцит, полученные с помощью

сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции. Микрочастицы карбоната кальция были получены методом копреципитации, их средний диаметр 4.5 ± 1.0 мкм. Представленные временные зависимости имели экспоненциальный характер, время эксперимента составляло 35 ч.

На полученных в результате проведенных исследований зависимостях видно, что полная перекристаллизация сформированных на волокнах поликапролактона микрочастиц ватерита в кальцит занимает 24 ч, при этом уменьшение времени перекристаллизации обусловлено уменьшением в 3 раза размера синтезированных микрочастиц.

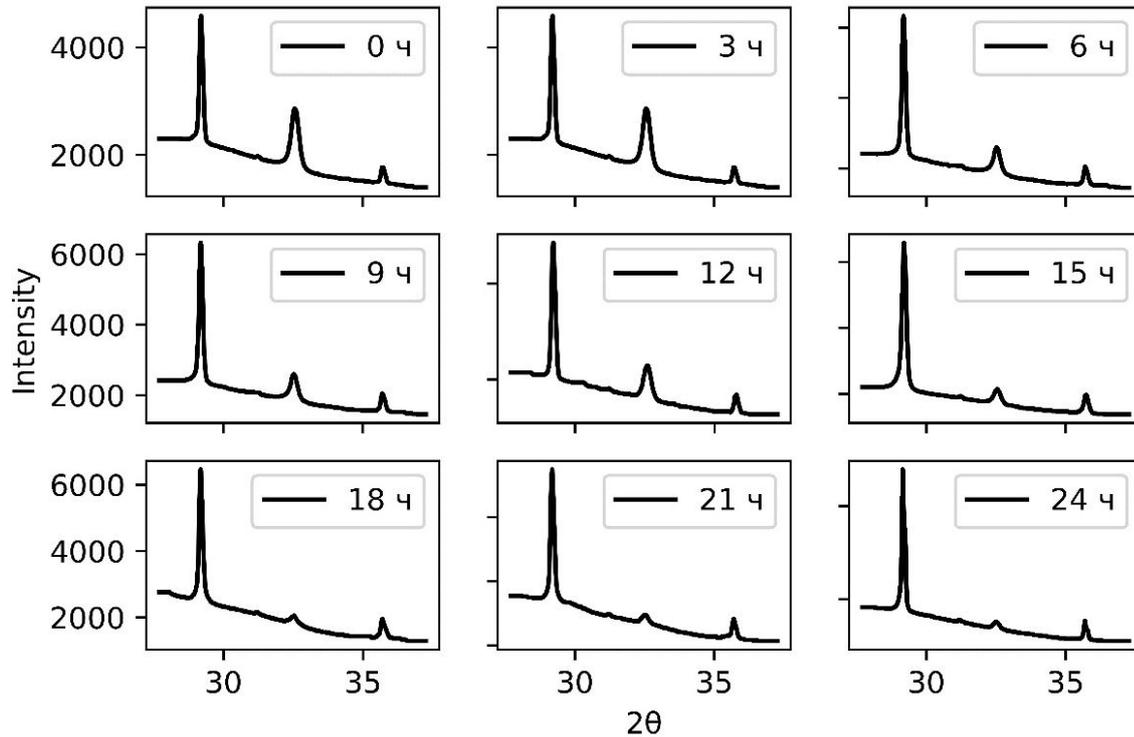


Рис. 3. Рентгеновские дифрактограммы исследуемых образцов композитных нетканых материалов в интервале 2θ от 27° до 37° в рассматриваемых временных точках

Fig. 3. X-ray diffractograms of the studied samples of composite nonwovens in the 2θ range from 27° to 37° at the considered time points

Массовые и количественные доли микрочастиц ватерита и кальцита относительно карбоната кальция в исследуемых временных точках, %

Table. Mass and quantitative fractions of vaterite and calcite microparticles relative to calcium carbonate at the studied time points, %

Время эксперимента, ч / Experiment time, h	Количественная доля ватерита / Quantitative fraction of vaterite	Количественная доля кальцита / Quantitative fraction of calcite	Массовая доля ватерита / Mass fraction of vaterite	Массовая доля кальцита / Mass fraction of calcite
0	98	2	70.7	29.3
3	95.5	4.5	69.2	30.8
6	88.5	11.5	66	34
9	79.7	22	51.4	48.6
12	73.5	27	47.3	52.7
15	26.3	73.5	25.1	74.9
18	–	–	24.6	75.4
21	3	97	15.1	84.9
24	0	100	7	93

Таким образом, предложенная в [18] методика оценки объёмной доли сформированных на поверхности волокон поликапролактона микрочастиц карбоната кальция с помощью анализа результатов сканирующей электронной микроскопии, подтверждается результатами рентгенодифракционного анализа.

Различие на начальном этапе эксперимента результатов, полученных с помощью сканирующей электронной микроскопии, и рентгеновской дифракции может быть объяснено разностью плотностей упаковки микрочастиц ватерита и кальцита, определяющей функциональную возможность использования микрочастиц ватерита

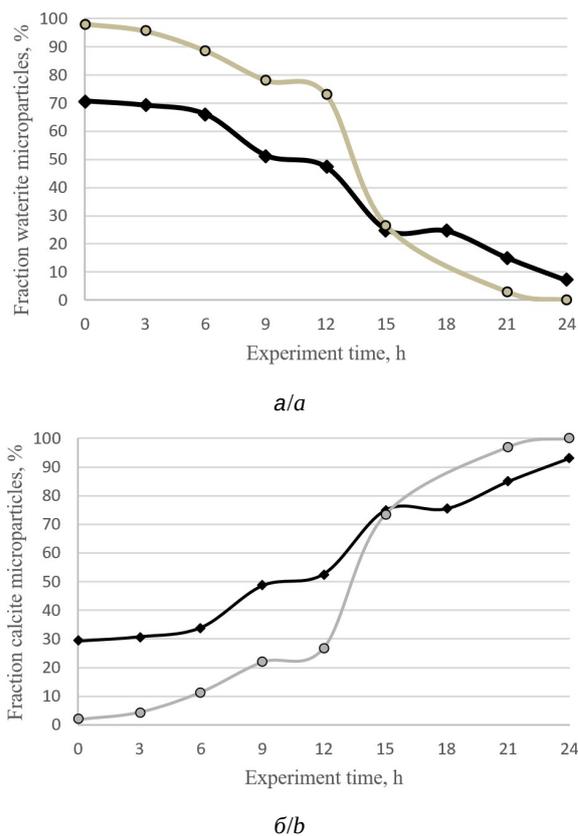


Рис. 4. Зависимость массовых (чёрная линия) и количественных (серая линия) долей микрочастиц ватерита (а) и кальцита (б) относительно микрочастиц карбоната кальция от длительности эксперимента

Fig. 4. Dependence of mass (black line) and quantitative (grey line) fractions of waterite microparticles (a) and calcite (b) microparticles relative to calcium carbonate microparticles on the duration of the experiment

в качестве контейнера для доставки лекарственных средств. Начиная с 15-го часа эксперимента различие зависимостей массовых и количественных долей микрочастиц от времени проведения эксперимента становится незначительным. На 18-му часу эксперимента происходит распад микрочастиц ватерита на фрагменты размером менее 100 нм, площадь их поверхности многократно увеличивается, что приводит к ускорению процесса перекристаллизации. К 18-му часу эксперимента доля микрочастиц ватерита составляет не более 25%, причем частицы расположены не на поверхности, а в объёме. Таким образом, высвобождение биологически активного вещества, инкапсулированного в поры частиц ватерита, происходит в процессе перекристаллизации [22], которая, как нами было установлено, для случая композитных нетканых материалов, проходит за время не более 18 часов.

Заключение

С помощью сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции был исследован процесс перекристаллизации микрочастиц ватерита, сформированных на волокнах поликапролактона со средним размером 1.2 ± 0.4 мкм в кальцит. Полный процесс перекристаллизации занимает 24 часа.

На 15-м часу происходит разрушение сформированных микрочастиц ватерита на фрагменты размером менее 100 нм, что многократно увеличивает площадь поверхности частиц и приводит к резкому ускорению процесса их перекристаллизации в кальцит. Эффективное время использования композитного материала для доставки и высвобождения инкапсулированных биоактивных соединений ограничено 18 часами, после чего происходит перекристаллизация всех микрочастиц ватерита на поверхности образца.

Методика количественного анализа с помощью сканирующей электронной микроскопии и определение массовых долей с помощью метода рентгеновской дифракции являются взаимодополняемыми и качественно согласующимися методами исследования процесса перекристаллизации микрочастиц ватерита в кальцит.

Список литературы

1. Yang J., Deng C., Shafiq M., Li Z., Zhang Q., Du H., Li S., Zhou X., He C. Localized delivery of FTY-720 from 3D printed cell-laden gelatin/silk fibroin composite scaffolds for enhanced vascularized bone regeneration // *Smart Materials in Medicine*. 2022. Vol. 3. P. 217–229. <https://doi.org/10.1016/j.smaim.2022.01.007>
2. Grayson W., Martens T., Eng G., Radisic M., Vunjak-Novakovic G. Biomimetic approach to tissue engineering / eds. M. Levin, S. Rétaux. Academic Press, 2009. Vol. 20, № 6. P. 665–673. (Seminars in Cell & Developmental Biology). <https://doi.org/10.1016/j.semcd.2008.12.008>
3. Darder M., Aranda P., Ruiz-Hitzky E. Bionanocomposites: A new concept of ecological, bioinspired, and functional hybrid materials // *Advanced Materials*. 2007. Vol. 19, № 10. P. 1309–1319. <https://doi.org/10.1002/adma.200602328>
4. Thadepalli S. Review of multifarious applications of polymers in medical and health care textiles // *Materials Today: Proceedings*. 2022. Vol. 55. P. 330–336. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.07.513>
5. Inozemtseva O. A., Salkovskiy Y. E., Severyukhina A. N., Vidyasheva I. V., Petrova N. V., Metwally H. A., Stetsiura I. Y., Gorin D. A. Electrospinning of functional materials for biomedicine and tissue engineering // *Russian Chemical Reviews*. 2015. Vol. 84, № 3. P. 251–274. <https://doi.org/10.1070/RCR4435>



6. Powell H. M., Boyce S. T. Engineered human skin fabricated using electrospun collagen-PCL blends: Morphogenesis and mechanical properties // *Tissue Engineering Part A*. 2009. Vol. 15, iss. 8. P. 2177–2187. <https://doi.org/10.1089/ten.tea.2008.0473>
7. Kolambkar Y. M., Peister A., Ekaputra A. K., Hutmacher D. W., Guldborg R. E. Colonization and osteogenic differentiation of different stem cell sources on electrospun nanofiber meshes // *Tissue Engineering Part A*. 2010. Vol. 16, № 10. P. 3219–3330. <https://doi.org/10.1089/ten.tea.2010.0004>
8. Shafiee A., Soleimani M., Chamheidari G. A., Seyedjafari E., Dodel M., Atashi A., Gheisari Y. Electrospun nanofiber-based regeneration of cartilage enhanced by mesenchymal stem cells // *Journal of Biomedical Materials Research A*. 2011. Vol. 99, № 3. P. 467–478. <https://doi.org/10.1002/jbm.a.33206>
9. Savelyeva M. S., Abalymov A. A., Lyubun G. P., Vidya-sheva I. V., Yashchenok A. M., Douglas T. E. L., Gorin D. A., Parakhonskiy B. V. Vaterite coatings on electrospun polymeric fibers for biomedical applications // *Journal of Biomedical Materials Research Part A*. 2017. Vol. 105, № 1. P. 94–103. <https://doi.org/10.1002/jbm.a.35870>
10. Saveleva M. S., Ivanov A. N., Kurtukova M. O., Atkin V. S., Ivanova A. G., Lyubun G. P., Martyukova A. V., Cherevko E. I., Sargsyan A. K., Fedonnikov A. S., Norkin I. A., Skirtach A. G., Gorin D. A., Parakhonskiy B. V. Hybrid PCL/CaCO₃ scaffolds with capabilities of carrying biologically active molecules: Synthesis, loading and *in vivo* applications // *Materials Science and Engineering*. 2018. Vol. 85. P. 57–67. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2017.12.019>
11. Suzuki S., Ikada Y. Medical application // *Poly (Lactic Acid) Synthesis, Structures, Properties, Processing, Applications, and End of Life* / eds. Rafael A. Auras, Loong-Tak Lim, Susan E. M. Selke, Hideto Tsuji. Wiley, 2022. P. 581–604. (Wiley Series on Polymer Engineering and Technology).
12. Yin S., Zhang W., Zhang Z., Jiang X. Recent advances in scaffold design and material for vascularized tissue-engineered bone regeneration // *Advanced Healthcare Materials*. 2019. Vol. 8, № 10. Article number 1801433. <https://doi.org/10.1002/adhm.201801433>
13. Han Y. Biomimetic Design and Biocompatibility of Biomimetic Calcium Carbonate Nanocomposites for Skeletal Muscle Injury Repair // *Journal of Nanomaterials*. 2022. Vol. 2022. Article number 8072185. <https://doi.org/10.1155/2022/8072185>
14. Unger R. E., Stojanovic S., Besch L., Alkildani S., Schröder R., Jung O., Bogram C., Görke O., Najman S., Tremel W., Barbeck M. *In Vivo* Biocompatibility Investigation of an Injectable Calcium Carbonate (Vaterite) as a Bone Substitute including Compositional Analysis via SEM-EDX Technology // *International Journal of Molecular Sciences*. 2022. Vol. 23, № 3. Article number 1196. <https://doi.org/10.3390/ijms23031196>
15. Parakhonskiy B. V., Yashchenok A. M., Donatan S., Volodkin D. V., Tessarolo F., Antolini R., Möhwald H., Skirtach A. G. Macromolecule Loading into Spherical, Elliptical, Star-Like and Cubic Calcium Carbonate Carriers // *ChemPhysChem*, 2014. Vol. 15, iss. 13. P. 2817–2822. <https://doi.org/10.1002/cphc.201402136>
16. Roth R., Schoelkopf J., Huwyler J., Puchkov M. Functionalized calcium carbonate microparticles for the delivery of proteins // *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. 2018. Vol. 122. P. 96–103. <https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2017.10.012>
17. Yahaya S., Ibrahim T., Ibrahim A. R. Template-Free Synthesis and Control Drug Release of Calcium Carbonate-Hydroxylapatite Composite // *American Journal of Multidisciplinary Research and Innovation*. 2022. Vol. 1, № 2. P. 56–62. <https://doi.org/10.54536/ajmri.v1i2.248>
18. Короневский Н. В., Савельева М. С., Ломова М. В., Сергеева Б. В., Козлова А. А., Сергеев С. А. Композитные мезопористые ватерит-магнетитовые покрытия, выращенные на матрице из волокон поликапролактона // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика*. 2022. Т. 22, № 1. С. 62–71. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-1-62-71>
19. Trakoolwannachai V., Kheolamai P., Ummartyotin S. Characterization of hydroxyapatite from eggshell waste and polycaprolactone (PCL) composite for scaffold material // *Composites Part B: Engineering*. 2019. Vol. 173. Article number 106974. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.106974>
20. Yaseen S. A., Yiseen G. A., Li Z. Elucidation of calcite structure of calcium carbonate formation based on hydrated cement mixed with graphene oxide and reduced graphene oxide // *ACS Omega*. 2019. Vol. 4, iss. 6. P. 10160–10170. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00042>
21. Chong K. Y., Chia C. H., Zakaria S., Sajab M. S. Vaterite calcium carbonate for the adsorption of Congo red from aqueous solutions // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2014. Vol. 2, iss. 4. P. 2156–2161. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2014.09.017>
22. Sergeeva A., Sergeev R., Lengert E., Zakharevich A., Parakhonskiy B., Gorin D., Sergeev S., Volodkin D. Composite magnetite and protein containing CaCO₃ crystals. External manipulation and vaterite → calcite recrystallization-mediated release performance // *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2015. Vol. 7, iss. 38. P. 21315–21325. <https://doi.org/10.1021/acsmami.5b05848>

References

1. Yang J., Deng C., Shafiq M., Li Z., Zhang Q., Du H., Li S., Zhou X., He C. Localized delivery of FTY-720 from 3D printed cell-laden gelatin/silk fibroin composite scaffolds for enhanced vascularized bone regeneration. *Smart Materials in Medicine*, 2022, vol. 3, pp. 217–229. <https://doi.org/10.1016/j.smaim.2022.01.007>
2. Grayson W., Martens T., Eng G., Radisic M., Vunjak-Novakovic G. *Biomimetic approach to tissue engineering*. Ed. by M. Levin, S. Rétau. Seminars in Cell & Developmental Biology. Academic Press, 2009, vol. 20, no. 6, pp. 665–673. <https://doi.org/10.1016/j.semcd.2008.12.008>
3. Darder M., Aranda P., Ruiz-Hitzky E. Bionanocomposites: A new concept of ecological, bioinspired, and functional hybrid materials. *Advanced Materials*, 2007,



- vol. 19, iss. 10, pp. 1309–1319. <https://doi.org/10.1002/adma.200602328>
4. Thadepalli S. Review of multifarious applications of polymers in medical and health care textiles. *Materials Today: Proceedings*, 2022, vol. 55, pp. 330–336. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.07.513>
 5. Inozemtseva O. A., Salkovskiy Y. E., Severyukhina A. N., Vidyasheva I. V., Petrova N. V., Metwally H. A., Stetciura I. Y., Gorin D. A. Electrospinning of functional materials for biomedicine and tissue engineering. *Russian Chemical Reviews*, 2015, vol. 84, iss. 3, pp. 251–274. <https://doi.org/10.1070/RCR4435>
 6. Powell H. M., Boyce S. T. Engineered human skin fabricated using electrospun collagen-PCL blends: Morphogenesis and mechanical properties. *Tissue Engineering Part A*, 2009, vol. 15, iss. 8, pp. 2177–2187. <https://doi.org/10.1089/ten.tea.2008.0473>
 7. Kolambkar Y. M., Peister A., Ekaputra A. K., Hutmacher D. W., Guldborg R. E. Colonization and osteogenic differentiation of different stem cell sources on electrospun nanofiber meshes. *Tissue Engineering Part A*, 2010, vol. 16, iss. 10, pp. 3219–3330. <https://doi.org/10.1089/ten.tea.2010.0004>
 8. Shafiee A., Soleimani M., Chamheidari G. A., Seyedjafari E., Dodel M., Atashi A., Gheisari Y. Electrospun nanofiber-based regeneration of cartilage enhanced by mesenchymal stem cells. *Journal of Biomedical Materials Research A*, 2011, vol. 99, iss. 3, pp. 467–478. <https://doi.org/10.1002/jbm.a.33206>
 9. Savelyeva M. S., Abalymov A. A., Lyubun G. P., Vidyasheva I. V., Yashchenok A. M., Douglas T. E. L., Gorin D. A., Parakhonskiy B. V. Vaterite coatings on electrospun polymeric fibers for biomedical applications. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 2017, vol. 105, iss. 1, pp. 94–103. <https://doi.org/10.1002/jbm.a.35870>
 10. Saveleva M. S., Ivanov A. N., Kurtukova M. O., Atkin V. S., Ivanova A. G., Lyubun G. P., Martynukova A. V., Cherevko E. I., Sargsyan A. K., Fedonnikov A. S., Norkin I. A., Skirtach A. G., Gorin D. A., Parakhonskiy B. V. Hybrid PCL/CaCO₃ scaffolds with capabilities of carrying biologically active molecules: Synthesis, loading and in vivo applications. *Materials Science and Engineering*, 2018, vol. 85, pp. 57–67. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2017.12.019>
 11. Suzuki S., Ikada Y. Medical Application. In: Rafael A. Auras, Loong-Tak Lim, Susan E. M. Selke, Hideto Tsuji, eds. *Poly (Lactic Acid) Synthesis, Structures, Properties, Processing, Applications, and End of Life*. Wiley Series on Polymer Engineering and Technology. Wiley, 2022. P. 581–604.
 12. Yin S., Zhang W., Zhang Z., Jiang X. Recent advances in scaffold design and material for vascularized tissue-engineered bone regeneration. *Advanced Healthcare Materials*, 2019, vol. 8, iss. 10, article no. 1801433. <https://doi.org/10.1002/adhm.201801433>
 13. Han Y. Biomimetic Design and Biocompatibility of Biomimetic Calcium Carbonate Nanocomposites for Skeletal Muscle Injury Repair. *Journal of Nanomaterials*, 2022, vol. 2022, article no. 8072185. <https://doi.org/10.1155/2022/8072185>
 14. Unger R. E., Stojanovic S., Besch L., Alkildani S., Schröder R., Jung O., Bogram C., Görke O., Najman S., Tremel W., Barbeck M. In Vivo Biocompatibility Investigation of an Injectable Calcium Carbonate (Vaterite) as a Bone Substitute including Compositional Analysis via SEM-EDX Technology. *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, vol. 23, iss. 3, article no. 1196. <https://doi.org/10.3390/ijms23031196>
 15. Parakhonskiy B. V., Yashchenok A. M., Donatan S., Volodkin D. V., Tessarolo F., Antolini R., Möhwald H., Skirtach A. G. Macromolecule Loading into Spherical, Elliptical, Star-Like and Cubic Calcium Carbonate Carriers. *ChemPhysChem*, 2014, vol. 15, iss. 13, pp. 2817–2822. <https://doi.org/10.1002/cphc.201402136>
 16. Roth R., Schoelkopf J., Huwyler J., Puchkov M. Functionalized calcium carbonate microparticles for the delivery of proteins. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 2018, vol. 122, pp. 96–103. <https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2017.10.012>
 17. Yahaya S., Ibrahim T., Ibrahim A. R. Template-Free Synthesis and Control Drug Release of Calcium Carbonate-Hydroxylapatite Composite. *American Journal of Multidisciplinary Research and Innovation*, 2022, vol. 1, iss. 2, pp. 56–62. <https://doi.org/10.54536/ajmri.v1i2.248>
 18. Koronevskiy N. V., Savelyeva M. S., Lomova M. V., Sergeeva B. V., Kozlova A. A., Sergeev S. A. Composite mesoporous vaterite-magnetite coatings on polycaprolactone fibrous matrix. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2022, vol. 22, iss. 1, pp. 62–71. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-1-62-71>
 19. Trakoolwannachai V., Kheolamai P., Ummartyotin S. Characterization of hydroxyapatite from eggshell waste and polycaprolactone (PCL) composite for scaffold material. *Composites Part B: Engineering*, 2019, vol. 173, article no. 106974. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.106974>
 20. Yaseen S. A., Yiseen G. A., Li Z. Elucidation of calcite structure of calcium carbonate formation based on hydrated cement mixed with graphene oxide and reduced graphene oxide. *ACS Omega*, 2019, vol. 4, iss. 6, pp. 10160–10170. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00042>
 21. Chong K. Y., Chia C. H., Zakaria S., Sajab M. S. Vaterite calcium carbonate for the adsorption of Congo red from aqueous solutions. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2014, vol. 2, iss. 4, pp. 2156–2161. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2014.09.017>
 22. Sergeeva A., Sergeev R., Lengert E., Zakharevich A., Parakhonskiy B., Gorin D., Sergeev S., Volodkin D. Composite magnetite and protein containing CaCO₃ crystals. External manipulation and vaterite → calcite recrystallization-mediated release performance. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2015, vol. 7, iss. 38, pp. 21315–21325. <https://doi.org/10.1021/acsmi.5b05848>

Поступила в редакцию 04.03.2023; одобрена после рецензирования 20.03.2023; принята к публикации 24.03.2023
The article was submitted 04.03.2023; approved after reviewing 20.03.2023; accepted for publication 24.03.2023



МЕТОДИЧЕСКИЙ ОТДЕЛ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 188–194
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 188–194
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-188-194>, EDN: CRSNYK

Научная статья
УДК 530

Необратимость времени и обратимость движения в динамических уравнениях физики

В. И. Цой

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Цой Валерий Иванович, кандидат физико-математических наук, tsoyvi@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8055-4385>

Аннотация. Уравнения непрерывной динамики частиц и волн допускают решения с обратным следованием частиц по траекториям и волновых фронтов при инверсии времени. В связи с этим принято говорить, что эти уравнения обратимы и в них нет различия между прошлым и будущим. Однако возможна другая интерпретация, согласно которой инверсия времени служит только теоретическим методом, формально прорисовывающим реальные обратные движения. Согласно такой интерпретации физические законы непрерывного движения содержат в себе необратимость времени. Как прямое, так и обратное движение по конфигурациям в пространстве происходят с течением времени только в будущее.

Ключевые слова: необратимость времени, инверсия времени, обратимость динамического движения

Для цитирования: Цой В. И. Необратимость времени и обратимость движения в динамических уравнениях физики // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 2. С. 188–194. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-188-194>, EDN: CRSNYK

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Irreversibility of time and reversibility of motion in dynamic equations of physics

V. I. Tsoy

Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

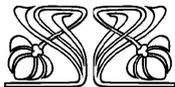
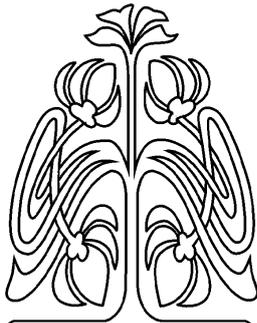
Valery I. Tsoy, tsoyvi@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8055-4385>

Abstract. Background and Objectives: The equations of dynamics of particles and waves admit solutions with the reverse flow of time. Therefore, it is generally assumed that the physical dynamics does not reflect the irreversibility of time. This article considers the inversion of time in dynamic equations of particles and waves. **Methods:** The transformations of dynamic equations including the time flow inversion were seen to conclude about time irreversibility. **Conclusion:** Transformations with reversed time have been seen in the dynamic equations of motion. These transformations show that real inversion of time is impossible. It the inverse motion of the particle and waves in the space is possible only on the straight flow of time.

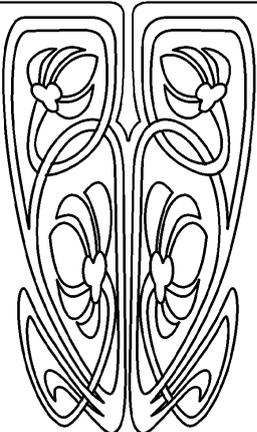
Keywords: irreversibility of time, inversion of time, reversibility of dynamic motion

For citation: Tsoy V. I. Irreversibility of time and reversibility of motion in dynamic equations of physics. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 2, pp. 188–194 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-188-194>, EDN: CRSNYK

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)



МЕТОДИЧЕСКИЙ
ОТДЕЛ





Введение

«В динамике, будь то классическая, квантовая или релятивистская динамика, время выступает лишь как некий внешний параметр, не имеющий выделенного направления. В динамике нет ничего такого, что позволяло бы отличать прошлое от будущего» [1, с. 217]. «В том, как оно входит в фундаментальные законы физики от классической динамики до теории относительности и квантовой физики, время не содержит в себе различия между прошлым и будущим!» [2, с. 4]. Эти слова выражают устоявшуюся интерпретацию того, что динамические уравнения физики инвариантны при определенных преобразованиях с инверсией времени [3, с. 477]. Преобразования с инверсией времени в динамических уравнениях помогают найти многие важные закономерности в физике. В частности, таким методом удается статистически объяснить фундаментальные свойства симметрии кинетических коэффициентов взаимности в неравновесной термодинамике [4–6].

Точнее, имеются в виду комбинированные преобразования с инверсией времени (например, с одновременным изменением направления импульсов частиц в уравнениях классической механики, магнитного поля в электродинамике, с сопряжением волновой функции в квантовой механике), при которых законы движения выполняются, а конфигурационные переменные (координаты, напряженности полей, волновые функции) меняются в обратной хронологической последовательности [3].

В данной статье показано, что даже в случае формального согласия с законами движения картина с движением в прошлое носит условный характер и не может осуществляться в реальности. Обратимое движение в пространстве для реальных частиц происходит только в одном – естественном – направлении времени.

1. Необратимость времени в обобщенном динамическом уравнении и обратимое движение по траектории частицы

В сжатом виде обобщенная запись уравнений движения представлена П. Дираком следующим образом. «Введем набор величин A любого в математическом отношении характера, чтобы описать физическое состояние в некоторый момент времени. Тогда уравнения движения имеют вид $dA/dt = f(A)$. Интегрируя эти уравнения, можно вычислить значения A в более поздний момент времени, выраженные через первоначальный набор величин A » [7, с. 121]. По часам,

отсчитывающим время t' в прошлое, и по часам, отсчитывающим время t в будущее, знаки сдвигов во времени противоположны: $dt' = -dt$. Тогда $dA/dt' = (dA/dt)(dt/dt') = -f(A)$. Требуя, чтобы движение в прошлое происходило по исходному динамическому закону, получим $f'(A) = -f(A)$, т. е. инверсия времени требует выполнения дополнительных условий.

В классической механике частицы динамическими переменными $A(t) = \{q(t), p(t)\}$ служат координаты частиц $q(t) = \{q_1, q_2, \dots, q_n\}$ и компоненты импульсов $p(t) = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$. Закон движения материальной точки под действием силы F в виде $\{dq/dt = p, dp/dt = F\}$ показывает, что при отсчете времени $dt < 0$ в прошлое импульсы должны стать противоположными импульсам при соответствующем отсчете времени $dt > 0$ в будущее, чтобы закон движения не нарушался. Формально переход к системе отсчета с часами, отсчитывающими время t' в прошлое, начиная с момента $t = t_0$ по часам в будущее, совершается преобразованиями

$$t' = -(t - t_0), q'(t') = q(t), p'(t') = -p(t), \quad (1)$$

которые не нарушают вид уравнений движения в предположении равенства гамильтонианов $H'(p', q') = H(p, q)$. Действительно, гамильтоновы уравнения в системе отсчета с инвертированным временем

$$dq'/dt' = \partial H'/\partial p', \quad (2a)$$

$$dp'/dt' = -\partial H'/\partial q' \quad (2b)$$

согласно преобразованиям (1) сохраняют свой вид в системе отсчета с естественным течением времени:

$$dq/(-dt) = \partial H/\partial(-p), \quad (3a)$$

$$d(-p)/(-dt) = -\partial H/\partial q. \quad (3b)$$

Рассмотрим свободное падение частицы единичной массы, $m = 1$, с высоты $q > 0$ на плоскость $q = 0$ в однородном поле тяготения с потенциальной функцией $U(q) = q$ из состояния покоя, с нулевым импульсом $p_{t=0} = 0$. График падения приведен на рис. 1. Чтобы проследить за обратным набором высоты («подскоком»), можно инвертировать время и импульс, $p_{t=1} \rightarrow -p_{t'=0}$, но этого оказывается недостаточным. График обратного движения на рис. 2 получается путем решения уравнений движения (2a), (2b) только в том случае, если в гамильтониане массу и потенциальную функцию принять равными, но противоположными по знаку по отношению к гамильтониану в уравнениях (3a), (3b). Заметим, что согласно преобразованиям (1) инверсия импульса в системе



отсчета с реальным временем означает отсутствие такой инверсии в системе с инверсией времени. Поэтому рис. 2 зеркален к рис. 1, и ускорение $d^2q'/dt'^2 < 0$ противоположно силе $dp'/dt' > 0$, что соответствует условному движению отрицательной массы.

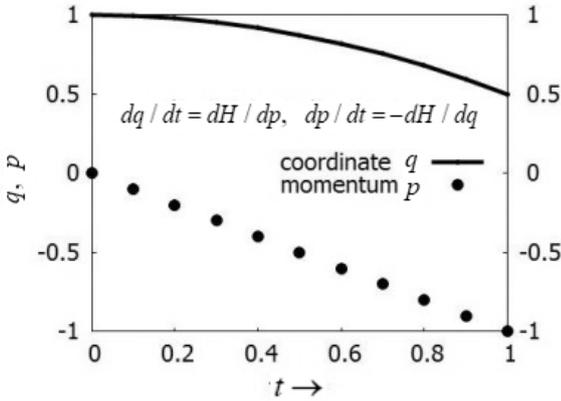


Рис. 1. Траектория и импульс свободно падающей частицы
Fig. 1. Trajectory and momentum when a particle falls freely

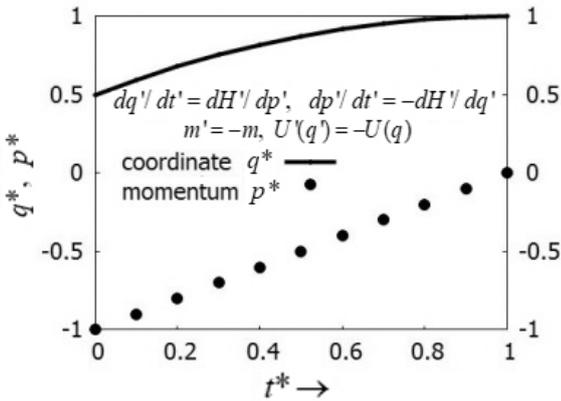


Рис. 2. Траектория и импульс при подскоке в системе отсчета с инвертированным временем
Fig. 2. Trajectory and momentum when a bounce is done, in a reference frame with inverted time

Очевидно, что уже простая смена интегрирования по времени в обратном направлении от конечных значений координаты и импульса до начальных значений приводит к перемещению точки по вычерченной ранее траектории в обратной последовательности. Но этот результат является решением уравнений

$$\{dq/(-dt) = \partial H/\partial p, dp/(-dt) = -\partial H/\partial q\},$$

которые не являются законом движения.

Можно сказать, что перемещения с инверсией одного только времени или совместно времени и импульса прорисовывают обратное движение

реальных частиц в реальном времени, но такие перемещения не осуществимы. Между тем перемена знака только импульса приводит к реальному обратному движению реальной частицы.

Примечательно, что необходимость перехода от положительного к отрицательному значению масс и смены направления сил при инверсии времени с сохранением закона движения следует также из уравнения Шредингера для волновой функции квантовой частицы. Достаточно просто обратиться к самому уравнению: $i\hbar\partial\psi/\partial t = -(1/2m)\nabla^2\psi + U(r)\psi$ [3]. Видно, что уравнение инвариантно относительно совместного изменения знаков на противоположные для времени t , массы m и потенциальной функции $U(r)$.

Таким образом, согласно динамическим уравнениям частица может совершать обратное движение по пройденной траектории только в реальном времени, а сценарии обратного перемещения с инверсией времени формальны. При этом преобразования (1) могут быть уточнены для классических частиц дополнительными преобразованиями

$$\begin{aligned} m' &= -m, & U'(q') &= -U(q), \\ H'(p', U(q'), m') &= H(p, U(q), m). \end{aligned} \quad (1a)$$

2. Статистическое обоснование соотношений взаимности Онсагера в неравновесной термодинамике

Одним из классических случаев, в которых учет обратных движений играет фундаментальную роль, является статистическое обоснование соотношений взаимности Онсагера – одной из основ неравновесной термодинамики [4–6]. Согласно основному закону неравновесной термодинамики производство энтропии S в системе с флуктуациями $\{\alpha_k\}$ термодинамических переменных определяется суммой произведений их скоростей (термодинамических потоков) $I_k = d\alpha_k/dt$ и сопряженных термодинамических сил $X_k = -\partial S/\partial\alpha_k$:

$$dS/dt = \sum I_k X_k. \quad (4)$$

В окрестности равновесного состояния флуктуации затухают, и уравнения неравновесной термодинамики имеют линеаризованный вид

$$d\alpha_k/dt = -\sum c_{kj}\alpha_j. \quad (5)$$

Так как в равновесном состоянии энтропия максимальна, её производные при малых аргументах α_k , т. е. термодинамические силы X_j , должны быть линейными комбинациями этих аргументов, которые, в свою очередь, могут быть линейно выражены через силы. Таким образом, каждый из потоков $d\alpha_k/dt$ определяется в общем случае



линейной комбинацией сил X_j с кинетическими коэффициентами L_{kj} по формуле

$$d\alpha_k/dt = \sum_j L_{kj} X_j. \quad (6)$$

Кинетические коэффициенты обладают важными свойствами симметрии, что можно установить с помощью корреляционных функций φ_{ik} флуктуаций α_i, α_k термодинамических переменных

$$\varphi_{ik}(\tau) = \langle \alpha_i(t) \alpha_k(t + \tau) \rangle. \quad (7)$$

Зависимость только от разности моментов времени для флуктуаций означает, что предполагается их стационарность, т. е. независимость относительно произвольного сдвига Δt во времени $t \rightarrow t + \Delta t$. Это справедливо, если в объеме, занимаемом системой, можно выделить физически малые объемы с мгновенным достижением локального термодинамического равновесия.

Таким образом, имеем признак стационарности в виде

$$\varphi_{ik}(\tau) = \langle \alpha_k(t) \alpha_i(t - \tau) \rangle = \varphi_{ki}(-\tau). \quad (8)$$

Необходимо считать, что корреляции порождаются влиянием флуктуаций на более поздние флуктуации. При $\tau > 0$ имеем в соотношениях (7), (8) влияние i -й термодинамической переменной на k -ю переменную. Чтобы проследить за обратным влиянием, нужно в корреляционной функции выбирать более ранней k -ю флуктуацию, т. е. сдвиг ($-\tau < 0$) в прошлое относительно i -й флуктуации. Это означает сдвиг $\tau > 0$ в будущее i -й флуктуации относительно k -й флуктуации, т. е. для обратного влияния имеем квазистационарную корреляцию

$$\varphi_{ki}(\tau) = \langle \alpha_k(t - \tau) \alpha_i(t) \rangle = \langle \alpha_k(t) \alpha_i(t + \tau) \rangle. \quad (9)$$

Далее заметим, что, рассматривая флуктуацию k -й переменной как более позднюю, мы должны выразить совместную плотность вероятности флуктуаций $p_\tau(\alpha_i, \alpha_k)$ через условную плотность вероятности $p_\tau(\alpha_i|\alpha_k)$, которая может трактоваться как вероятность перехода от состояния i -й переменной к состоянию k -й переменной. По принципу детального равновесия вероятности прямого и обратного перехода равны друг другу. При этом процедура усреднения в определении корреляционной функции не различает абсолютных моментов времени, а интервал времени τ

является параметром, влияющим лишь на распределения вероятностей переходов. Таким образом,

$$\begin{aligned} \varphi_{ik}(\tau) &= \langle \alpha_i(t) \alpha_k(t + \tau) \rangle = \\ &= \int [p(\alpha_i) p(\alpha_i|\alpha_k, \tau)] \alpha_i \alpha_k d\alpha_i d\alpha_k = \\ &= \int [p(\alpha_k) p(\pm\alpha_k|\alpha_i, \tau)] \alpha_i (\pm\alpha_k) d\alpha_i d\alpha_k = \\ &= \pm \langle \alpha_k(t) \alpha_i(t + \tau) \rangle = \pm \varphi_{ki}(\tau). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь учтено, что при обращении движения термодинамические переменные четны или нечетны по отношению к преобразованию координат и импульсов микрочастиц $\{q_k, p_k\} \rightarrow \{q_k, -p_k\}$ [6, с. 20]. Хотя это преобразование обычно рассматривают одновременно с инверсией времени, его одного уже достаточно для обращения движения в реальном времени. В итоге получаем, что детальное равновесие приводит к симметрии или к антисимметрии корреляционных функций флуктуаций термодинамических переменных относительно направления переходов между ними. Верхнюю часть равенства (10), $\varphi_{ik}(\tau) = \varphi_{ki}(\tau)$, обычно получают из требования инвариантности корреляционных функций относительно инверсии времени ($t \rightarrow -t$). Это требование считают частичным переносом механических законов движения микрочастиц на флуктуации термодинамических переменных [4, 5]. Его связывают с тем, что «основной признак микроскопической обратимости заключается в инвариантности всех механических уравнений движения по отношению к преобразованию ($t \rightarrow -t$)» [4, с. 68]. Такой путь вполне оправдан, но не является единственным, как показано выше. Отправляясь от принципа детального равновесия в реальном времени, можно установить симметрию корреляционных функций, не прибегая к преобразованиям с инверсией времени. При этом согласно условию стационарности $\varphi_{ik}(\tau) = \varphi_{ki}(-\tau)$ признаку детального равновесия $\varphi_{ik}(\tau) = \varphi_{ki}(\tau)$ можно придать вид инвариантности $\varphi_{ik}(\tau) = \varphi_{ik}(-\tau)$ относительно замены запаздывания на опережение. Этот итог совпадает с тем, который получается путем инверсии времени в корреляционной функции.

Из уравнения (10) следует, что

$$\langle \alpha_i(t) d\alpha_k/dt \rangle = \pm \langle \alpha_k(t) d\alpha_i/dt \rangle. \quad (11)$$

Это равенство прямо приводит к соотношениям взаимности [4, 5]. Подставляя выражение (6) в уравнение корреляций (11) и используя «ортогональность» термодинамических переменных



и сопряженных им сил $\langle \alpha_i X_k \rangle \propto \delta_{ik}$, немедленно получим соотношения симметрии Онсагера

$$L_{kj} = \pm L_{jk}. \quad (12)$$

Добавим еще раз, что преобразования с инверсией времени не относятся буквально к реальным движениям. Поэтому инвариантность корреляционных функций флуктуаций относительно инверсии времени должна расцениваться как весьма эффективный, но по существу формальный признак выполнения детального равновесия в обычном ходе времени.

3. Обращение волнового фронта

Если в молекулярном движении обратное движение играет роль только в рамках детального равновесия, то в оптике и электродинамике оно может проявляться явно. Простой пример – это принцип обратимости хода лучей света и обращение волнового фронта [3]. Как пояснено в книге [8], обращение волнового фронта удастся осуществить потому, что в когерентных волновых пучках число степеней свободы не менее, чем на двадцать порядков меньше числа степеней свободы в молекулярном движении, и их удастся обратить.

Проследить за пространственно-временной картиной движения и обратного движения волнового фронта нетрудно в случае монохроматического поля

$$\begin{aligned} E(\mathbf{R}, t) &= \Re [A(\mathbf{R}) e^{-i\omega t}] = \\ &= |A(\mathbf{R})| \Re [e^{-i\omega t + i\varphi(\mathbf{R})}] = \\ &= |A(\mathbf{R})|/2 [e^{-i\omega t + i\varphi(\mathbf{R})} + e^{i\omega t - i\varphi(\mathbf{R})}], \end{aligned} \quad (13)$$

где ω – угловая частота, $A(\mathbf{R})$ – комплексная амплитуда в точке с радиус-вектором \mathbf{R} , $\varphi(\mathbf{R})$ – локальная фаза, которой определяются форма и локальное направление волнового фронта.

Связь между комплексными амплитудами прямой и обращенной волн имеет вид [8]

$$A_{\text{обр}}(\mathbf{R}) = A^*(\mathbf{R}), \text{ или } \varphi_{\text{обр}}(\mathbf{R}) = -\varphi(\mathbf{R}). \quad (14)$$

Эта связь особенно наглядна в случае плоских волн, для которых фаза $\varphi(\mathbf{R}) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ определяется нормальным к фазовому фронту волновым вектором \mathbf{k} , задающим направление распространения фазы, а также направление плотности импульса. Последнее соответствует тому, что импульс кванта волны равен $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, а классическая плотность импульса плоской электромагнитной волны определяется компонентами тензора энергии импульса [9]

$$T^{\alpha 0}/c = (Wc/\omega)k^\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3 = x, y, z, \quad (15)$$

где W – плотность энергии, c – скорость света, ω – частота волны, k^α – компоненты волнового вектора.

Как видно из (14), $\mathbf{k}_{\text{обр}} = -\mathbf{k}$, т. е. при обращении волнового фронта обращается импульс волны, подобно тому, как обращается импульс частицы при обращении движения по траектории. Кроме того, равенство (13) не нарушается при совместной инверсии фазы и времени $\{\varphi(\mathbf{R}), t\} \rightarrow \{-\varphi(\mathbf{R}), -t\}$, если $E(\mathbf{R}, t) \rightarrow E(\mathbf{R}, -t)$. Это показывает, что обращенный волновой фронт распространяется в реальном времени в согласии с картиной возвратного движения фронта прямой волны при инверсии времени [10].

4. Обратные эффекты Доплера и Вавилова – Черенкова

Рассмотрим некоторые случаи, которые встречаются в волнах с взаимно противоположными направлениями фазовой и групповой скоростей, чем обусловлены некоторые специфические эффекты, в первую очередь аномальное преломление луча света в ту же сторону от нормали, в которой лежит падающий луч [11]. Такие волны и эффекты успешно реализованы в искусственных материалах с отрицательными электрическими и магнитными проницаемостями (эти метаматериалы называют по-разному: левые среды, среды с отрицательным показателем преломления, дважды отрицательные среды, среды с обратной волной и пр.). Одними из ярких эффектов в левых средах являются обратные эффекты Доплера и Вавилова – Черенкова, теоретически предсказанные и описанные в работах [12–14].

Запишем формулу для эффекта Доплера, объединив формулы из [10] и [13]:

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - V^2/c^2} / (1 - \delta(V/c) \cos \theta). \quad (16)$$

Здесь ω_0 – частота волны в системе источника, ω – частота, регистрируемая наблюдателем, $V > 0$ – скорость источника в системе наблюдателя, θ – угол между направлением испускания излучения и направлением движения источника в системе наблюдателя, Удаляющемуся источнику в формуле (16) отвечает тупой угол θ . Параметр δ принимает значения $\delta = +1$ для обычной правой среды и $\delta = -1$ для левой среды. Видно, что в левой среде частота волны от удаляющегося источника увеличена, а не уменьшена, как в обычном случае, т. е. эффект Доплера обращен. Полагая $u = V\delta$, представим формулу (16) в форме

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - u^2/c^2} / (1 - (u/c) \cos \theta), \quad (17)$$



где теперь переход от правой среды к левой совершается путем изменения знака скорости u . При неизменном направлении движения источника это изменение знака нужно отнести к инверсии времени $u = d|\mathbf{R}|/dt \rightarrow d|\mathbf{R}|/(-dt) = -u$. Таким образом, можно трактовать обращение эффекта Доплера в терминах инверсии времени.

Геометрию свечения Вавилова – Черенкова при равномерном сверхсветовом движении электрона в среде получают прямо из формулы для эффекта Доплера [12]. Учитывая, что в состоянии покоя электрон не может излучать, а только окружен постоянным полем, полагают в выражениях (16) или (17) частоту излучения в системе источника нулевой, $\omega_0 = 0$. Тогда в лабораторной системе может присутствовать излучение на конечной частоте ω при условии $1 - (u/c)\cos\theta = 0$, т. е. в виде полого конуса лучей с угловым раскрытием $\cos\theta = c/u$. Это возможно, если скорость электрона V превышает скорость света c в среде. Кроме того, в левой среде с $u = -V$ конус лучей обращен к конусу в правой среде с $u = +V$. Как видно, переход от прямого эффекта Черенкова к обратному эффекту также можно трактовать в терминах инверсии времени, приводящей к смене знака скорости.

Заключение

Преобразования динамических уравнений с инверсией времени являются эффективным теоретическим инструментом, позволяющим находить существенные черты обратимых процессов и условия, при которых они возможны. Благодаря этому возникло и устоялось представление о том, что в динамических уравнениях время выступает параметром, не имеющим выделенного направления и позволяющим совершать равным образом движение и в будущее, и в прошлое. Считается, что только такие явления, как необратимые макроскопические процессы неравновесной термодинамики и квантовые коллапсы, отражают в физике необратимость времени.

Однако некоторые детали описания обращенного движения путем преобразований с инверсией времени дают возможность другой интерпретации, согласно которой в динамических уравнениях время имеет выделенное направление. Для обращения движения частицы в реальном времени достаточно инверсии импульса. В случае инверсии одного только времени картина обратного движения по траектории вырисовывается, но с нарушением динамических законов движения. При

совместной инверсии времени и импульса обратное перемещение по траектории представляется происходящим в согласии с динамическими законами, но для отрицательной массы и при условии смены знака потенциала. Это говорит в пользу того мнения, что по физическим законам динамики реальным может быть движение только с течением времени в будущее.

Одним из самых весомых аргументов в пользу утверждения о том, что динамика непрерывных движений не различает направлений хода времени, считается то, что перенос инвариантности относительно инверсии времени микроскопических уравнений на корреляцию флуктуаций термодинамических переменных позволил получить теоретически соотношения симметрии кинетических коэффициентов. Однако к этому результату можно прийти, исходя из принципа детального равновесия, не прибегая к инверсии времени.

С другой стороны, в волновой динамике такие явления, как обращение волнового фронта, обратные эффекты в левых средах изначально описываются без обращения к преобразованиям времени. Но эти эффекты могут трактоваться также и в терминах инверсии времени.

Таким образом, для описания обратных движений динамическими уравнениями нет исключительной необходимости исходить из преобразований с инверсией времени. Более того, подобные преобразования либо не согласуются с уравнениями движения, либо предполагают свойства, не допустимые в физике, например отрицательную массу классических частиц. Это означает, что динамические уравнения непрерывного движения содержат в себе условие одностороннего течения времени в будущее.

Список литературы

1. Пригожин И. От существующего к возникающему. М. : КомКнига, 2006. 328 с.
2. Пригожин И., Стенгерс И. Время, хаос, квант. К решению парадокса времени. М. : Едиториал УРСС, 2003. 240 с.
3. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. М. : Советская энциклопедия, 1983. 928 с.
4. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. Ижевск : НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 160 с.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика: в 2 ч. М. : Наука, 1976. Ч. 1. 584 с.
6. Биккин Х. М., Ляпилин И. И. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. Екатеринбург : УрО РАН, 2009. 500 с.



7. Дирак П. А. М. Можно ли использовать уравнения движения в физике высоких энергий? // УФН. 1971. Т. 103. С. 121–126. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0103.197101d.0121>
8. Зельдович Б. Я., Пилипецкий Н. Ф., Шкунов В. В. Обращение волнового фронта. М. : Наука, 1985. 240 с.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М. : Наука, 1988. 510 с.
10. Зельдович Б. Я., Пилипецкий Н. Ф., Шкунов В. В. Обращение волнового фронта при вынужденном рассеянии света // УФН. 1982. Т. 138. С. 249–288. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0138.198210d.0249>
11. Мандельштам Л. И. Лекции по оптике, теории относительности и квантовой механике. М. : Наука, 1972. 440 с.
12. Пафомов В. Е. Переходное излучение и черенковское излучение // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1853–1858.
13. Веселаго В. Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ϵ и μ // УФН. 1967. Т. 92. С. 517–526. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0092.196707d.0517>
14. Франк И. М. Импульс фотона в среде с отрицательной групповой скоростью // Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 28. С. 482–485.
4. Prigozhin I. *Vvedeniye v termodinamiku neobratimyykh protsessov* [Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes]. Izhevsk, NITs “Regular and chaotic dynamics” Publ., 2001. 160 p. (in Russian).
5. Landau L. D., Lifshitz E. M. *Statisticheskaya fizika: v 2 ch.* [The Statistical Physics: in 2 pt.]. Moscow, Nauka, 1976, part 1. 584 p. (in Russian).
6. Bikkin Kh. M., Lyapilin I. I. *Neravnovesnaya termodinamika i fizicheskaya kinetika* [Nonequilibrium Thermodynamics and Physical Kinetics]. Ekaterinburg, UrO RAN Publ., 2009. 500 p. (in Russian).
7. Dirac P. A. M. Can Equations of Motion be Used in High-Energy Physics? *Phys. Today*, vol. 23, pp. 29–31. <https://doi.org/10.1063/1.3022063>
8. Zel'dovich B. Ya., Pilipetskii N. F., Shkunov V. V. *Obrascheniye volnovogo fronta* [Wavefront Reversal]. Moscow, Nauka, 1985. 240 p. (in Russian).
9. Landau L. D., Lifshitz E. M. *The Classical Theory of Fields*. Pergamon Press, Oxford, 1971. 374 p. (Russ. ed.: Moscow, Nauka, 1988, 510 p.).
10. Zel'dovich B. Ya., Pilipetskii N. F., Shkunov V. V. Phase conjugation in stimulated scattering. *Sov. Phys. Usp.*, 1982, vol. 25, pp. 713–737. <https://doi.org/10.1070/PU1982v025n10ABEH004605>
11. Mandel'shtam L. I. *Leksii po optike, teorii otноситel'nosti i kvantovoy mekhanike* [Lectures on the Optics, Relativity and Quantum Mechanics]. Moscow, Nauka, 1972. 440 p. (in Russian).

References

1. Prigozhin I. *Ot suchshestvuyuchshego k voznikayuchshemu* [From Being to Arising]. Moscow, KomKniga, 2006. 328 p. (in Russian).
2. Prigozhin I., Stengers I. *Vremya, khaos, kvant. K resheniyu paradoksa vremeni* [Time, Chaos, Quant. To Decision of Time Paradox]. Moscow, Editorial URSS, 2003. 240 p. (in Russian).
3. *Fizicheskiy entsiklopedicheskiy slovar. Gl. red. A. M. Prokhorov* [Prokhorov A. M., chief ed. Physical Encyclopedic Dictionary]. Moscow, Sovetskaya Entsyclopedia, 1983. 928 p. (in Russian).
12. Pafomov V. E. Transition Radiation and Cerenkov Radiation. *Soviet Physics JETP*, 1959, vol. 36, pp. 1321–1324.
13. Veselago V. G. The Electrodynamics of Substances with Simultaneously Negative Values of ϵ and μ . *Sov. Phys. Usp.*, 1968, vol. 10, pp. 509–514. <https://doi.org/10.1070/PU1968v010n04ABEH003699>
14. Frank I. M. Photon Momentum in a Medium with Negative Group Velocity. *JETP Lett.*, 1978, vol. 28, pp. 446–448.

Поступила в редакцию 03.09.2022; одобрена после рецензирования 19.10.2022; принята к публикации 20.10.2022
The article was submitted 03.09.2022; approved after reviewing 19.10.2022; accepted for publication 20.10.2022



ISSN 1817-3020 (Print). ISSN 2542-193X (Online)
Известия Саратовского университета. Новая серия.
Серия: Физика. 2023. Том 23, выпуск 2

ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА Новая серия

- Серия: Акмеология образования. Психология развития
- Серия: История. Международные отношения
- Серия: Математика. Механика. Информатика
- Серия: Науки о Земле
- Серия: Социология. Политология
- Серия: Физика**
- Серия: Филология. Журналистика
- Серия: Философия. Психология. Педагогика
- Серия: Химия. Биология. Экология
- Серия: Экономика. Управление. Право

