

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

ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Новая серия

Серия: Физика

2026

Том 26

Выпуск 1



IZVESTIYA OF SARATOV UNIVERSITY
PHYSICS



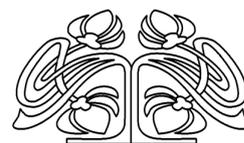
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского»

ИЗВЕСТИЯ

САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Новая серия

Серия Физика, выпуск 1



Научный журнал
2026 Том 26

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

Издается с 2005 года

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

СОДЕРЖАНИЕ

Научный отдел

Теоретическая и математическая физика

- Скрипаль Ал. В., Пономарев Д. В., Волшаник М. А., Добдин С. Ю.**
Резонансные эффекты в СВЧ фотонных кристаллах с поглотителем на основе целлюлозной бумаги 4
- Еремеев В. П., Осипов Г. В.**
Четыре сценария перехода к спайковой активности в новой модели нейрона 19

Оптика и спектроскопия. Лазерная физика

- Алонова М. В., Злобина И. В., Бекренев Н. В., Зимняков Д. А.**
Анализ структурных изменений СВЧ- и УЗ-модифицированных углепластовых композитов методом низкокогерентной рефлектометрии 31

Биофизика и медицинская физика

- Дубровский А. И., Дмитренко А. В., Федосов И. В., Семячкина-Глушковская О. В., Вениг С. Б.**
Измерение коэффициента диффузии флуоресцентного красителя в тканях головного мозга мыши методом восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания 45

Твердотельная электроника, микро- и нанoeлектроника

- Глухова О. Е., Колесниченко П. А.**
Повышение эффективности метода SCC DFTB в описании межатомных взаимодействий и предсказании электронных свойств 53
- Кочуров Л. А.**
Моделирование кинетики деградации проводимости в наноструктурированных низкоразмерных полупроводниковых слоях при длительном воздействии постоянного тока 62

Нанотехнологии, наноматериалы и метаматериалы

- Абрамова А. М., Калишина К. Р., Зобнина Е. А., Горячева И. Ю.**
Гидротермальная функционализация золотых наночастиц фолиевой кислотой и полиэтиленгликолем 72
- Глухова О. Е., Герасименко А. Ю., Слепченков М. М.**
Многостенные углеродные нанотрубки с индексами хиральности стенок ($m, 2m$): упругие и электропроводные свойства 84
- Сердобинцев А. А., Коларькова К. В., Оломская В. В., Русанова Т. Ю., Горячева И. Ю., Демина П. А.**
Гибридный люминесцентный материал на основе электроформованной полимерной матрицы с инкапсулированными квантовыми точками $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ 93
- Прихожденко Е. С.**
Разработка и оптимизация нетканых подложек полиамида-6 для гигантского комбинационного рассеяния 102

Университетская летопись

Из истории физики

- Аникин В. М.**
Академик Федор Михайлович Митенков: саратовские годы биографии 112

Приложение

Personalia

- Профессору Василию Фёдоровичу Названову – 90 лет 128

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.

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

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 (категория К1, 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, 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

Трубникова Татьяна Александровна,

Редактор-стилист

Агафонов Андрей Петрович

Верстка

Пермяков Алексей Сергеевич

Технический редактор

Каргин Игорь Анатольевич

Корректор

Агафонов Андрей Петрович

В оформлении издания использованы работы художника Соколова Дмитрия Валерьевича (13.11.1940–20.11.2023)

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 20.03.2026.

Подписано в свет 31.03.2026.

Выход в свет 31.03.2026.

Формат 60 × 84 1/8.

Усл. печ. л. 15.4 (16.5).

Тираж 100 экз. Заказ 7-Т.

Отпечатано в типографии
Саратовского университета.

Адрес типографии:

410012, Саратов, Б. Казачья, 112А

© Саратовский университет, 2026



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.

Для публикации статьи необходимо загрузить на сайт журнала: текст статьи, оформленный согласно правилам журнала; направление от организации (отсканированное в формате pdf); лицензионный договор (отсканированный в формате pdf); экспертное заключение; согласие на обработку персональных данных.

Список литературы следует оформлять в соответствии с ГОСТ Р7.0.5-2008 «Библиографическая ссылка». В списке литературы нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте. Ссылки на неопубликованные работы не допускаются. В библиографическом списке должны быть указаны только процитированные в статье работы.

Все рукописи, поступившие в редколлегию 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

Theoretical and Mathematical Physics

- Skripal A. I., Ponomarev D. V., Volshanik M. A., Dobdin S. Yu.**
Resonance effects in microwave photonic crystals with a cellulose paper-based absorber 4

- Eremeev V. P., Osipov G. V.**
Four scenarios for the transition to spiking activity in a new neuron model 19

Optics and Spectroscopy. Laser Physics

- Alonova M. V., Zlobina I. V., Bekrenev N. V., Zimnyakov D. A.**
Analysis of structural changes in microwave- and ultrasound-modified carbon-fiber-reinforced polymer composites by low-coherence reflectometry 31

Biophysics and Medical Physics

- Dubrovsky A. I., Dmitrenko A. V., Fedosov I. V., Semyachkina-Glushkovskaya O. V., Venig S. B.**
Fluorescent dye diffusion coefficient measurement in murine brain tissues using the method of fluorescence recovery after photobleaching 45

Solid-State Electronics, Micro- and Nanoelectronics

- Glukhova O. E., Kolesnichenko P. A.**
Improving the efficiency of the SCC DFTB method in describing interatomic interactions and predicting electronic properties 53

- Kochkurov L. A.**
Modelling of conduction degradation kinetics in nanostructured low-dimensional semiconductor layers under long-term DC exposure 62

Nanotechnologies, Nanomaterials and Metamaterials

- Abramova A. M., Kalishina K. R., Zobnina E. A., Goryacheva I. Yu.**
Simultaneous functionalization of gold nanoparticles with folic acid and polyethyleneglycol 72

- Glukhova O. E., Gerasimenko A. Yu., Slepchenkov M. M.**
Multi-walled carbon nanotubes with wall chirality indices (m , $2m$): Elastic and electrically conductive properties 84

- Serdobintsev A. A., Kolarkova K. V., Olomskaya V. V., Rusanova T. Yu., Goryacheva I. Yu., Demina P. A.**
Hybrid luminescent material based on an electrospun polymer matrix with encapsulated AgInS₂/ZnS quantum dots 93

- Prikhozhenko E. S.**
Development and optimization of electrospun polyamide-6 nonwoven substrate for surface-enhanced Raman scattering 102

University Chronicle

From the History of Physics

- Anikin V. M.**
Academician Fyodor M. Mitenkov: Saratov years of the biography 112

Appendix

Personalia

- Professor Vasily Fedorovich Nazhanov turns 90 128



**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:

Анкин 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)

Дербов Владимир Леонардович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

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

Жу Дан, Ph.D., профессор Хуачжунского университета науки и технологий (Ухань, Китай)

Захарова Анна Сергеевна, Dr. Habil, профессор Берлинского технического университета (Берлин, Германия)

Ларин Кирилл Владимирович, Ph.D., 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)

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, Ph.D., 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)

Vladimir L. Derbov (Saratov, Russia)

Arnaud Dubois (Saint-Aubin, France)

Yuri A. Filimonov (Saratov, Russia)

Alexander V. Gorokhov (Samara, Russia)

Nikolai G. Khlebtsov (Saratov, Russia)

Kirill V. Larin (Houston, USA)

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)

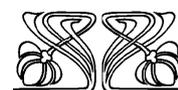
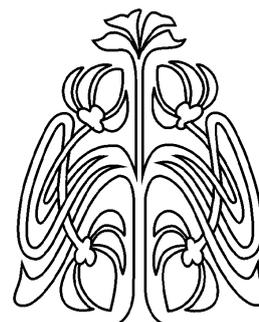
Tatyana E. Vadivasova (Saratov, Russia)

Sergey I. Vinitzky (Dubna, Russia)

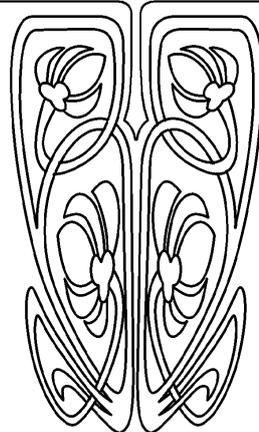
Sergey B. Venig (Saratov, Russia)

Anna S. Zakharova (Berlin, Germany)

Dan Zhu (Wuhan, China)



**РЕДАКЦИОННАЯ
КОЛЛЕГИЯ**

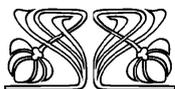
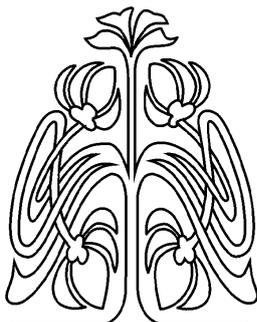




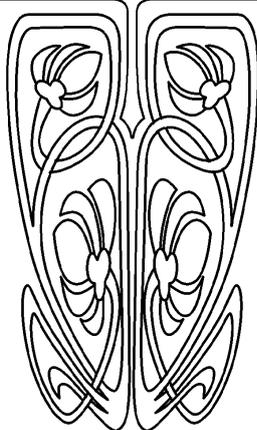
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 4–18
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 4–18
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-4-18>, EDN: COLBYW

Научная статья
УДК 621.372.2



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ



Резонансные эффекты в СВЧ фотонных кристаллах с поглотителем на основе целлюлозной бумаги

Ал. В. Скрипаль , Д. В. Пономарев, М. А. Волшаник, С. Ю. Добдин

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

Скрипаль Александр Владимирович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики твердого тела Института физики, skripala_v@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7448-4560>, AuthorID: 36844

Пономарев Денис Викторович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела Института физики, ponomarev87@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7822-937X>, AuthorID: 561183

Волшаник Мария Алексеевна, аспирант кафедры физики твердого тела Института физики, trimar97@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0001-1726-8586>, AuthorID: 1256016

Добдин Сергей Юрьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела Института физики, sergant1986@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0801-4664>, AuthorID: 684129

Аннотация. Теоретически и экспериментально исследовано возникновение фотонных таммовских резонансов в запрещенных зонах одномерного сверхвысокочастотного фотонного кристалла при использовании поглотителя электромагнитной энергии, созданного на основе водосодержащих структур (материалы «зелёной» электроники) в виде матрицы из целлюлозной бумаги с различной массовой долей наполнителя – дистиллированной воды для реализации интерфейса с управляемыми параметрами. На основании результатов компьютерного моделирования с использованием метода матрицы передачи и эксперимента доказана возможность управления фотонными резонансами Тамма с помощью изменения толщины слоя целлюлозы, массовой доли дистиллированной воды и толщины воздушного зазора между фотонным кристаллом и слоем целлюлозы. При увеличении толщины целлюлозной бумаги, содержащей дистиллированную воду при её массовой доле более 51%, наблюдаются затухающие осцилляции частот таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах. Увеличение толщины целлюлозной бумаги также приводит к затухающим осцилляциям коэффициентов отражения в первой и второй запрещённых зонах, величины которых при больших толщинах целлюлозной бумаги становятся постоянными величинами, зависящими как от массовой доли воды, так и от зазора между последним слоем фотонного кристалла и слоем целлюлозной бумаги. Изменение параметров интерфейса с помощью регулировки величины воздушного зазора между фотонным кристаллом и слоем целлюлозы позволяет управлять амплитудой таммовских резонансов. При этом для каждой фиксированной толщины слоя целлюлозы с конкретной величиной массовой доли дистиллированной воды для достижения максимальной амплитуды таммовского резонанса следует выбрать вполне определённую величину воздушного зазора.

Ключевые слова: фотонный кристалл, таммовский резонанс, интерфейс, целлюлоза, дистиллированная вода, сверхвысокочастотный диапазон

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-22-00199, <https://rscf.ru/project/25-22-00199/>).



Для цитирования: Скрипаль Ал. В., Пономарев Д. В., Волшаник М. А., Добдин С. Ю. Резонансные эффекты в СВЧ фотонных кристаллах с поглотителем на основе целлюлозной бумаги // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 4–18. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-4-18>, EDN: COLBYW

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

Article

Resonance effects in microwave photonic crystals with a cellulose paper-based absorber

Al. V. Skripal[✉], D. V. Ponomarev, M. A. Volshaniк, S. Yu. Dobdin

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

Alexander V. Skripal, skripala_v@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7448-4560>, AuthorID: 36844

Denis V. Ponomarev, ponomarev87@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7822-937X>, AuthorID: 561183

Maria A. Volshaniк, trimar97@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0001-1726-8586>, AuthorID: 1256016

Sergey Y. Dobdin, sergant1986@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0801-4664>, AuthorID: 684129

Abstract. Background and Objectives: One promising direction for developing environmentally friendly electromagnetic wave absorbers involves using structures that incorporate polar liquids, such as water. This is because water in the microwave range exhibits both a significant real part and a significant imaginary part of the complex permittivity. Such structures can be either continuous water layers or composite surfaces comprising individually arranged periodic droplets. Compared to more traditional materials, electromagnetic radiation absorbers based on composite water-containing structures offer several advantages, such as biocompatibility, availability, ease of fabrication, and optical transparency. One example of such a composite is cellulose paper acting as a matrix, filled with distilled water. Composite structures based on cellulose and its derivatives with inclusions of carbon nanotubes and silver nanowires are already known to be used as absorbers. Using an absorber made of such a composite material as an interface layer in a photonic crystal enables the observation of various resonance effects arising from the specific properties of the interface. Altering the electromagnetic characteristics of this interface layer leads to changes in the frequency and amplitude of the photonic Tamm resonance. Therefore, it is of interest to study the emergence of Tamm resonances within the band gap of a microwave photonic crystal that utilizes an electromagnetic energy absorber based on water-containing cellulose paper as the interface layer. Furthermore, this study aims to demonstrate interface control by varying the mass fractions of distilled water. **Materials and Methods:** The experimental structure was fabricated as a photonic crystal comprising alternating layers of two different dielectric materials inside a rectangular waveguide. A layer of cellulose paper containing distilled water was sandwiched between two Teflon films and placed immediately adjacent to the last layer of the photonic crystal. A vector network analyzer was used to measure the frequency characteristics in the 7–13 GHz frequency range. Numerical calculations for the layered structures were performed using the transfer matrix method. **Results:** As the thickness of the cellulose paper containing distilled water (with a mass fraction of more than 51%) increases, damped oscillations of the Tamm resonance frequencies have been observed within the first and second band gaps. Increasing the cellulose paper thickness has also led to damped oscillations of the reflectivity coefficients in these band gaps. For greater cellulose paper thicknesses, these values have been stabilized, becoming constant. The final values depend on both the mass fraction of water and the size of the air gap between the last layer of the photonic crystal and the cellulose paper layer. **Conclusion:** Adjusting the interface parameters by regulating the air gap between the photonic crystal and the cellulose layer allows for control over the Tamm resonance amplitude. For each fixed cellulose layer thickness with a specific mass fraction of distilled water, a particular air gap value must be selected to achieve the maximum Tamm resonance amplitude.

Keywords: photonic crystal, Tamm resonance, interface, cellulose, distilled water, microwave range

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (Project No. 25-22-00199, <https://rscf.ru/project/25-22-00199/>).

For citation: Skripal Al. V., Ponomarev D. V., Volshaniк M. A., Dobdin S. Yu. Resonance effects in microwave photonic crystals with a cellulose paper-based absorber. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 4–18 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-4-18>, EDN: COLBYW

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

Введение

Резонансные свойства СВЧ фотонных кристаллов обусловлены интерференционными эффектами, возникающими при взаимодействии с ними электромагнитного излучения [1–4]. Ряд резонансных эффектов может быть обусловлен особенностями интерфейса структуры фотонного кристалла.

Известно, что использование в качестве интерфейса структур, содержащих поглотители электромагнитной энергии, может приводить

к возникновению резонансов в запрещённой зоне фотонного кристалла, называемых поверхностными фотонными состояниями в СВЧ фотонных кристаллах. В качестве поглотителей электромагнитной энергии могут быть использованы слои материалов, обладающих высокими потерями, например высокопроводящие полупроводниковые и металлических нанослои [5, 6].

Одним из направлений развития экологически безопасных поглотителей электромагнитной энергии является использование структур, со-



держащих полярные жидкости, например воду, поскольку вода в СВЧ-диапазоне характеризуется значительной величиной как действительной части комплексной диэлектрической проницаемости, так и её мнимой части [7, 8]. В качестве таких структур могут быть использованы сплошные слои воды и слои в виде отдельных периодически расположенных капель [9, 10]. Структура в виде отдельных капель представляет собой композитную поверхность, характеризующуюся эффективной комплексной диэлектрической проницаемостью. Поглотители электромагнитного излучения на основе водосодержащих структур по сравнению с более традиционными материалами на основе слоёв с высокой электропроводностью [11–14], обладают рядом преимуществ, таких как биосовместимость, доступность, простота настройки, оптическая прозрачность. При этом водосодержащие поглотители могут использоваться в сетях Wi-Fi, сотовых телефонах и бытовой технике для ослабления вредных для организма человека воздействий электромагнитных волн [10].

При реализации фотонного таммовского состояния наблюдается локализация электрического поля электромагнитной волны внутри фотонного кристалла на границе его интерфейса. Изменение электромагнитных характеристик интерфейса приводит к изменению частоты и амплитуды фотонного таммовского резонанса [15, 16].

В качестве интерфейса с управляемыми характеристиками можно использовать поглотитель в виде композитного материала. Таким композитом может выступать целлюлозная бумага, выполняющая роль матрицы, наполнителем которой служит дистиллированная вода. К настоящему времени известно применение в качестве поглотителей композитных структур на основе целлюлозы и её производных [17] с включениями из углеродных нанотрубок и серебряных нанопроволок [18–21].

В настоящей работе представлены результаты исследований эффекта возникновения таммовских резонансов в запрещённой зоне фотонного кристалла СВЧ-диапазона при использовании поглотителя электромагнитной энергии, созданного на основе водосодержащих структур (материалы «зелёной» электроники) в виде матрицы из целлюлозной бумаги с различной массовой долей наполнителя – дистиллированной воды для реализации интерфейса с управляемыми параметрами.

1. Моделирование СВЧ фотонного кристалла с интерфейсом в виде поглотителя на основе целлюлозной бумаги

Нами исследовались СВЧ фотонные кристаллы на основе прямоугольного волновода с диэлектрическим заполнением в виде периодически чередующихся слоев керамики Al_2O_3 (нечетные слои, $\epsilon = 9.6$, толщина 0.5 мм) и тефлона (четные слои, $\epsilon = 2.0$, толщина 18 мм). Фотонные кристаллы состояли из 11 слоев, слои полностью заполняли поперечное сечение волновода. Количество слоёв выбиралось из условия достаточности для получения ярко выраженной зонной структуры амплитудно-частотных характеристик фотонного кристалла в X-диапазоне.

К фотонному кристаллу примыкал отрезок волновода, заполненный сплошным слоем водосодержащей структуры толщиной d в виде целлюлозной бумаги с различной массовой долей дистиллированной воды. С целью обеспечения постоянства массовой доли дистиллированной воды в течение всего эксперимента слой целлюлозной бумаги ограничивался с двух сторон тонкой тефлоновой плёнкой ($\epsilon = 2.0$) толщиной 30 мкм. Между водосодержащей структурой и последним слоем фотонного кристалла создавался воздушный зазор, толщина L , которого варьировалась (рис. 1).

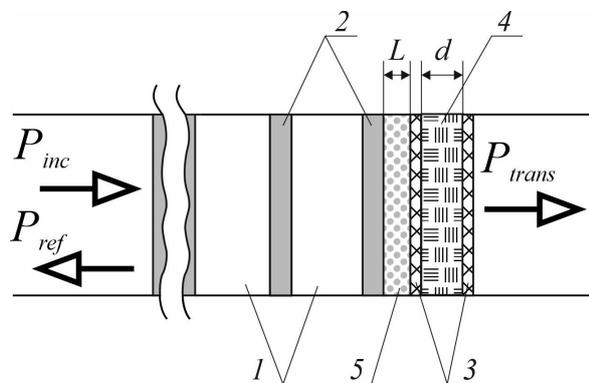


Рис. 1. Конструкция одномерного СВЧ фотонного кристалла с поглотителем электромагнитного излучения СВЧ-диапазона на основе водосодержащих структур в качестве интерфейса: 1 – слой тефлона, 2 – слой Al_2O_3 , 3 – плёнки тефлона, 4 – слой композита в виде целлюлозной бумаги с различной массовой долей дистиллированной воды, 5 – воздушный зазор. P_{inc} , P_{trans} , P_{ref} – входной, прошедший и отражённый сигналы

Fig. 1. Design of a one-dimensional microwave photonic crystal with microwave absorber based on water-containing structures as an interface: 1 – teflon layer, 2 – Al_2O_3 layer, 3 – teflon films, 4 – composite layer in the form of cellulose paper with different mass fractions of distilled water, 5 – air gap. P_{inc} , P_{trans} , P_{ref} – incident, transmitted, and reflected signals

Для расчета частотных зависимостей коэффициентов отражения $S_{11}(f)$ и прохождения $S_{21}(f)$



электромагнитной волны использовалась матрица передачи слоистой структуры с различными значениями постоянной распространения электро-

магнитных волн (γ_i и γ_{i+1}) при учете распространения в волноводе только волны основного типа H_{10} [4, 22–24]:

$$T(z_{j,j+1}) = \begin{pmatrix} \frac{\gamma_{j+1} + \gamma_j}{2\gamma_{j+1}} \exp((\gamma_{j+1} - \gamma_j) z_{j,j+1}) & \frac{\gamma_{j+1} - \gamma_j}{2\gamma_{j+1}} \exp((\gamma_{j+1} + \gamma_j) z_{j,j+1}) \\ \frac{\gamma_{j+1} - \gamma_j}{2\gamma_{j+1}} \exp(-(\gamma_{j+1} + \gamma_j) z_{j,j+1}) & \frac{\gamma_{j+1} + \gamma_j}{2\gamma_{j+1}} \exp(-(\gamma_{j+1} - \gamma_j) z_{j,j+1}) \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты отражения S_{11} и прохождения S_{21} электромагнитной волны, взаимодействующей со слоистой структурой, определяли через элементы матрицы передачи T_N с помощью соотношений:

$$S_{11} = -\frac{T_N[2, 1]}{T_N[2, 2]}, S_{21} = \frac{T_N[1, 1]T_N[2, 2] - T_N[1, 2]T_N[2, 1]}{T_N[2, 2]},$$

где $T_N = \begin{pmatrix} T_N[1, 1] & T_N[1, 2] \\ T_N[2, 1] & T_N[2, 2] \end{pmatrix} = \prod_{j=N}^0 T_{j,(j+1)} = T(z_{N,N+1}) \cdot T(z_{N-1,N}) \dots T(z_{1,2}) \cdot T(z_{0,1})$ – матрица передачи слоистой структуры, состоящей из N слоев.

Постоянные распространения электромагнитной волны: в пустом волноводе γ_0 , в диэлектрических слоях γ_d , и в слое целлюлозной бумаги $\gamma_{цб}$ с полным заполнением волновода по поперечному сечению и с различной массовой долей дистиллированной воды – были рассчитаны с использованием выражений:

$$\gamma_0 = \sqrt{\frac{\pi^2}{a^2} - \omega^2 \epsilon_0 \mu_0}, \quad \gamma_d = \sqrt{\frac{\pi^2}{a^2} - \omega^2 \epsilon_d \epsilon_0 \mu_0}, \\ \gamma_{цб} = \sqrt{\frac{\pi^2}{a^2} - \omega^2 \epsilon_{цб}^* \epsilon_0 \mu_0},$$

где $\epsilon_{цб}^*$ – комплексная диэлектрическая проницаемость слоя целлюлозной бумаги, $\omega = 2\pi f$ – круговая частота электромагнитной волны; ϵ_0 и μ_0 – электрическая и магнитная постоянные; ϵ_d – относительная диэлектрическая проницаемость диэлектрического слоя.

При расчёте частотных зависимостей коэффициентов отражения $S_{11}(f)$ и прохождения $S_{21}(f)$ фотонного кристалла использовались экспериментальные значения действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*(f)$ слоя целлюлозной бумаги, измеренные в диапазоне частот 7–13 GHz при различных массовых долях X дистиллированной воды (рис. 2). Измерения частотной зависимости $\epsilon^*(f)$ выполнялись с использованием векторного анализатора цепей Agilent PNA-X Network Analyzer N5242A (США, Agilent Technologies) и программного обеспечения Agilent 85071E Materials Measurement Software [25].

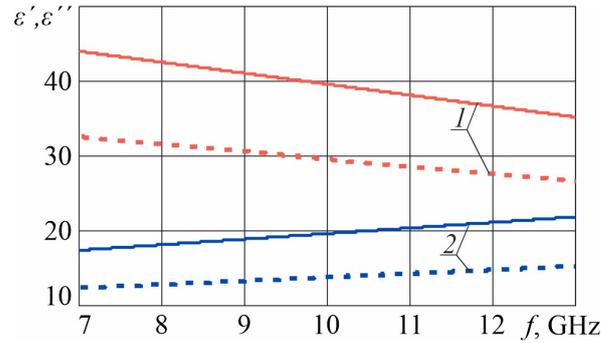


Рис. 2. Экспериментальные частотные зависимости действительной $\epsilon'(f)$ (линии 1) и мнимой $\epsilon''(f)$ (линии 2) частей комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*(f)$ слоя целлюлозной бумаги при массовой доле дистиллированной воды 51% (штриховые линии) и 55% (сплошные линии) (цвет онлайн)

Fig. 2. Experimental frequency dependences of the real $\epsilon'(f)$ (curves 1) and imaginary $\epsilon''(f)$ (curves 2) parts of the complex permittivity $\epsilon^*(f)$ of a cellulose paper layer with a mass fraction of distilled water equal to 51% (dashed lines) and 55% (solid lines) (color online)

Как следует из результатов расчетов, применение целлюлозной бумаги с различной массовой долей полярной жидкости – дистиллированной воды – в качестве интерфейса приводит к возникновению в первой и во второй запрещенных зонах на частотах f_{Tamm1} и f_{Tamm2} таммовских резонансов, положение которых зависит от толщины целлюлозы при фиксированной массовой доле воды (рис. 3).

При увеличении толщины целлюлозной бумаги, содержащей дистиллированную воду при её массовой доле 51% и 55%, наблюдаются затухающие осцилляции частот f_{Tamm1} и f_{Tamm2} таммовских резонансов в первой (рис. 4, а) и второй запрещённых зонах (рис. 4, б). Так, например, при массовой доле 55% осцилляции в первой запрещённой зоне исчезают при толщинах больших ~ 10.0 мм, а их период составляет ~ 3.0 мм. Во второй зоне осцилляции исчезают при толщинах больших ~ 5.5 мм с периодом ~ 1.8 мм.

Увеличение толщины целлюлозной бумаги также приводит к затухающим осцилляциям коэффициентов отражения в первой и второй

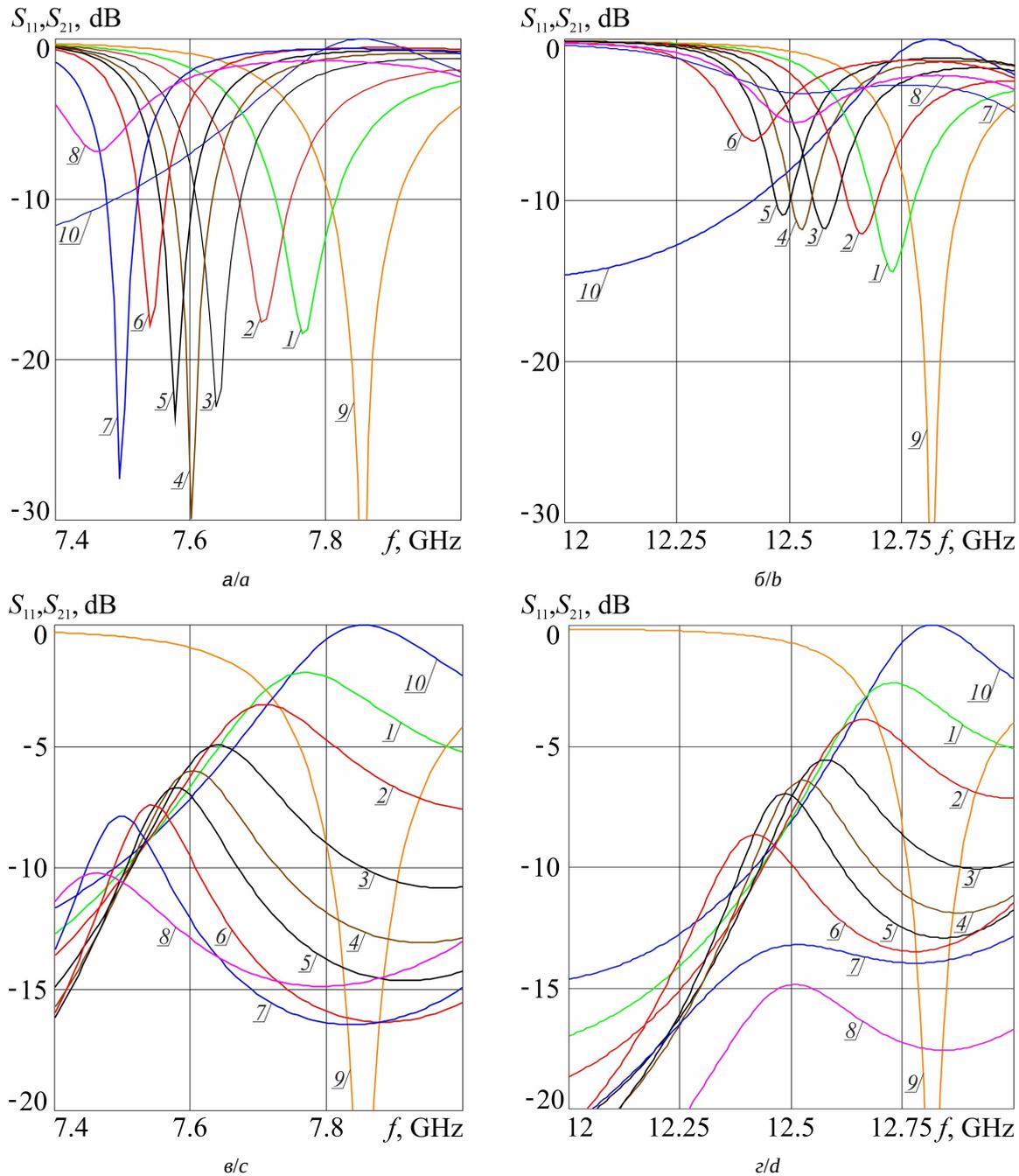


Рис. 3. Частотные зависимости: коэффициента отражения S_{11} в первой (а) и второй (б) запрещённых зонах, коэффициента прохождения S_{21} в первой (в) и второй (г) запрещённых зонах 11-слойного фотонного кристалла с интерфейсом в виде целлюлозной бумаги при фиксированной массовой доле дистиллированной воды 55% при различной толщине поглощающего электромагнитное излучение слоя d , мм: 1 – 0.1, 2 – 0.2, 3 – 0.4, 4 – 0.6, 5 – 0.8, 6 – 1.2, 7 – 1.8, 8 – 2.4. Кривые 9 (для S_{11}) и 10 (для S_{21}) отвечают случаю отсутствия поглотителя. $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)

Fig. 3. Frequency dependences of the reflection coefficient S_{11} in the first (a) and second (b) band gaps and transmission coefficient S_{21} in the first (в) and second (г) band gaps of an 11-layer photonic crystal with the interface layer in the form of absorber made of cellulose paper at a fixed mass fraction of distilled water 55% for different thicknesses d , mm: 1 – 0.1, 2 – 0.2, 3 – 0.4, 4 – 0.6, 5 – 0.8, 6 – 1.2, 7 – 1.8, 8 – 2.4, Curves 9 (S_{11}) and 10 (S_{21}) correspond to the absence of the absorber. $L = 0.0$ mm (color online)

(рис. 5) запрещённых зонах, величины которых при больших толщинах целлюлозной бумаги становятся постоянными величинами, зависящими

как от массовой доли воды, так и от зазора между последним слоем фотонного кристалла и слоем целлюлозной бумаги.

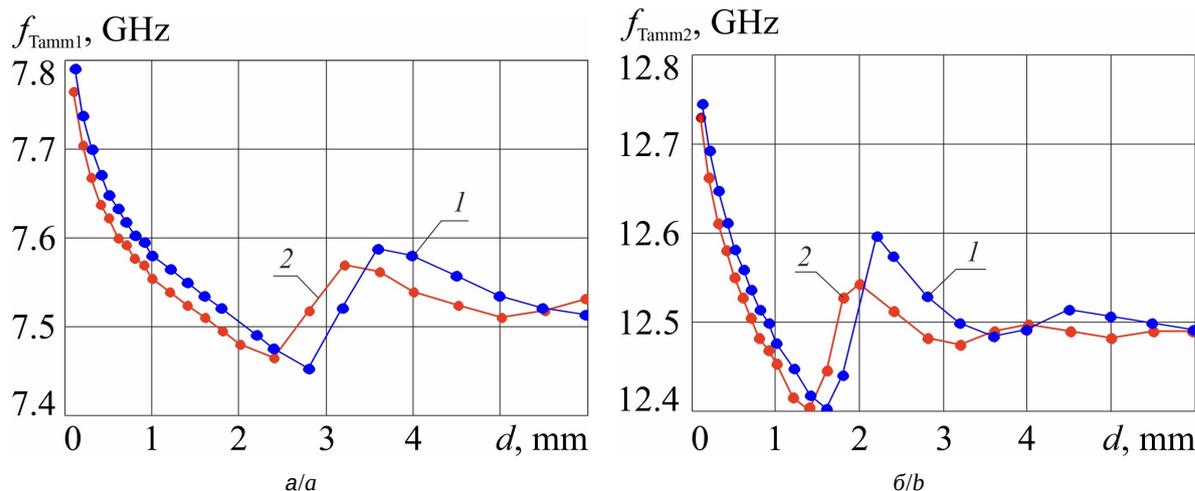


Рис. 4. Зависимости частоты таммовского резонанса f_{Tamm1} в первой (а) и f_{Tamm2} во второй (б) запрещённых зонах от толщины d слоя целлюлозы. Массовая доля воды 51% (кривые 1) и 55% (кривые 2). $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)
 Fig. 4. Dependences of the Tamm resonance frequency f_{Tamm1} in the first (a) and f_{Tamm2} in the second (b) band gaps on the cellulose layer thickness d . The water mass fraction is 51% (curves 1) and 55% (curves 2). $L = 0.0$ mm (color online)

Зависимости коэффициента прохождения в первой и второй запрещённых зонах от толщины слоя целлюлозной бумаги являются монотонно убывающими функциями (рис. 6).

быть отражены в виде диаграммы в координатах «амплитуда ($S_{11\text{Tamm}}$) – частота (f_{Tamm})» (рис. 7). Эту диаграмму можно назвать «фазовым портретом таммовского резонанса», каждая точка которого соответствует определённой толщине d слоя целлюлозной бумаги.

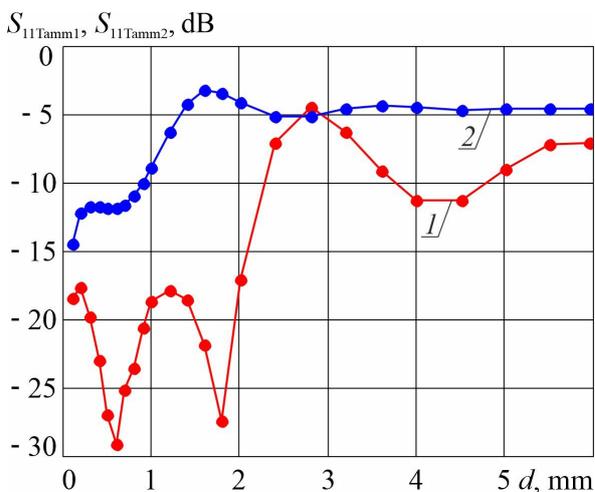


Рис. 5. Зависимости амплитуд коэффициентов отражения таммовского резонанса $S_{11\text{Tamm1}}$ (кривая 1) в первой и $S_{11\text{Tamm2}}$ (кривая 2) во второй запрещённых зонах от толщины d слоя целлюлозной бумаги. Массовая доля воды 55%. $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)
 Fig. 5. Dependences of the amplitudes of the Tamm resonance reflection coefficients $S_{11\text{Tamm1}}$ (curve 1) in the first and $S_{11\text{Tamm2}}$ (curve 2) in the second band gap on the thickness d of the cellulose paper layer. The mass fraction of water is 55%. $L = 0.0$ mm (color online)

Особенности характеристик фотонных таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах фотонного кристалла в зависимости от толщины слоя целлюлозной бумаги могут

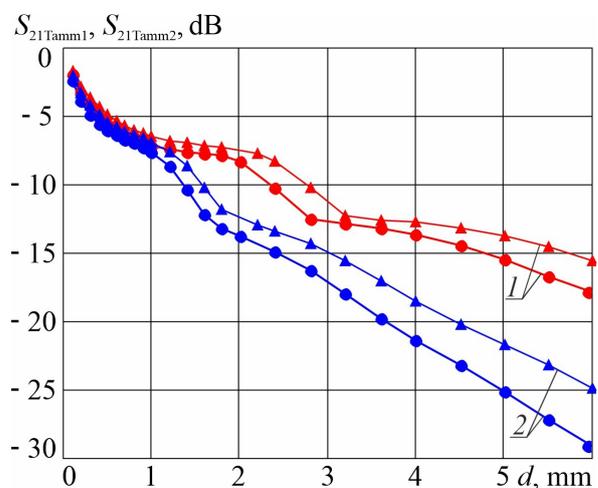


Рис. 6. Зависимости амплитуд коэффициентов прохождения таммовского резонанса $S_{21\text{Tamm1}}$ в первой (кривые 1) и $S_{21\text{Tamm2}}$ (кривые 2) во второй запрещённых зонах от толщины d слоя целлюлозной бумаги для массовых долей воды 51% (треугольные метки) и 55% (круглые метки). $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)
 Fig. 6. Dependences of the amplitudes of the Tamm resonance transmission coefficients $S_{21\text{Tamm1}}$ in the first (curves 1) and $S_{21\text{Tamm2}}$ in the second (curves 2) band gaps on the thickness d of the cellulose paper layer. The mass fraction of water is 51% (triangular marks) and 55% (circle marks). $L = 0.0$ mm (color online)

Положение резонансов в запрещённых зонах определяется как геометрическими размерами



и электромагнитными характеристиками целлюлозной бумаги, зависящими от массовой доли полярной жидкости, так и её расположением относительно фотонного кристалла.

Как следует из результатов расчета АЧХ фотонного кристалла, представленных на рис. 8 и 9, увеличение воздушного зазора L между слоем целлюлозной бумаги и последним слоем фотон-

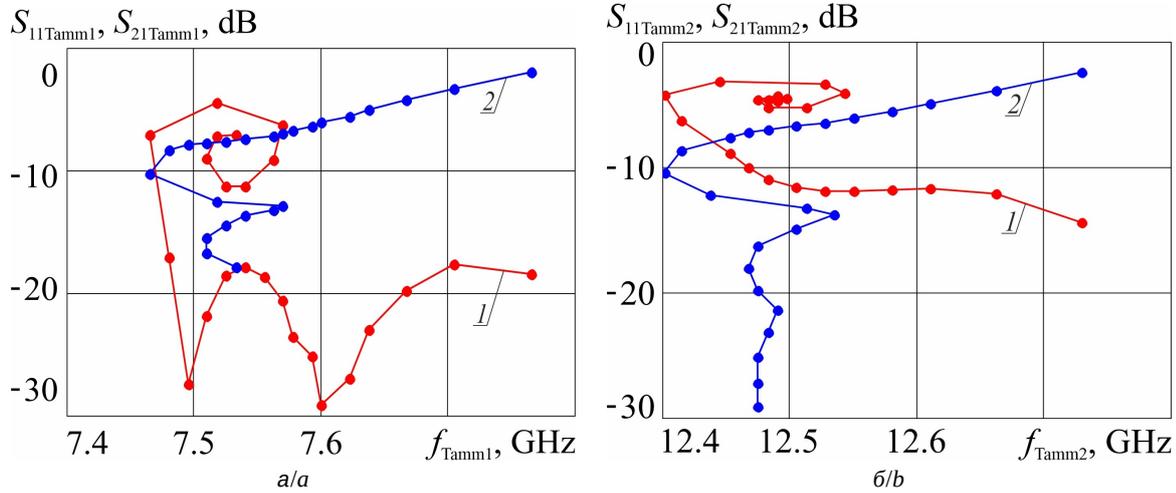


Рис. 7. Диаграммы «амплитуда – частота» таммовского резонанса в первой (кривые 1) и второй (кривые 2) запрещенных зонах: $S_{11Tamm1}$, $S_{21Tamm1}$, f_{Tamm1} – в первой запрещенной зоне (а); $S_{11Tamm2}$, $S_{21Tamm2}$, f_{Tamm2} – во второй запрещенной зоне фотонного кристалла (б). Массовая доля воды 55%. $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)

Fig. 7. The “amplitude – frequency” diagrams of the Tamm resonance in the first (curves 1) and second (curves 2) band gaps of the photonic crystal: $S_{11Tamm1}$, $S_{21Tamm1}$, f_{Tamm1} in the first band gap (a); $S_{11Tamm2}$, $S_{21Tamm2}$, f_{Tamm2} in the second band gap (b). The mass fraction of water is 55%. $L = 0.0$ mm (color online)

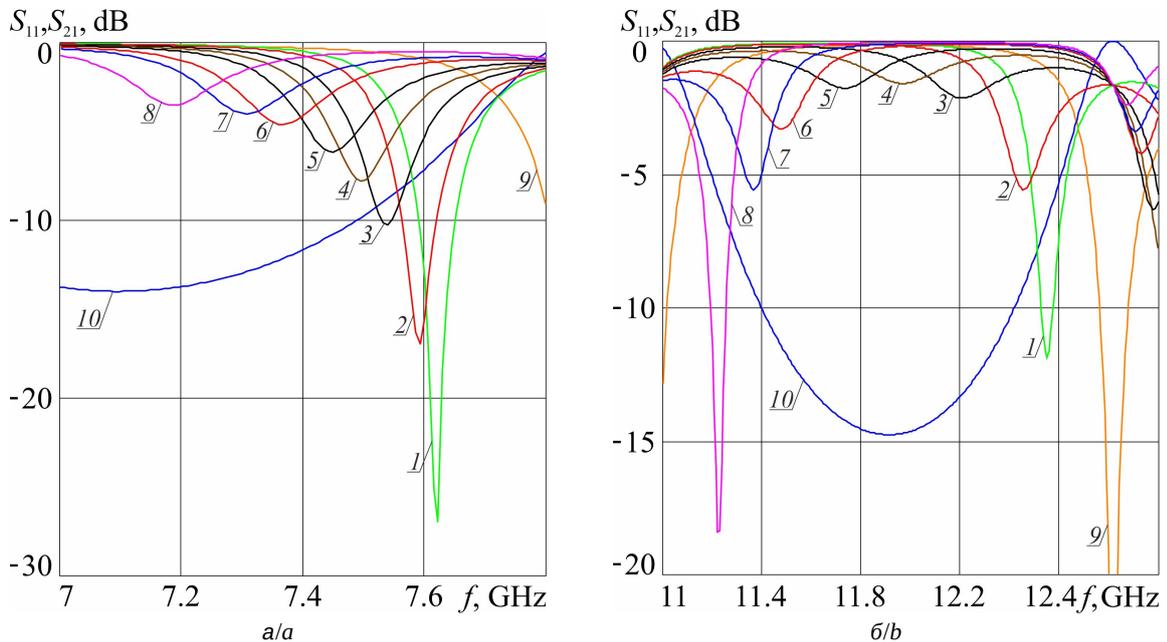


Рис. 8. Частотные зависимости коэффициента отражения S_{11} в первой (а) и второй (б) запрещённых зонах 11-слойного фотонного кристалла при использовании в качестве интерфейса поглотителя электромагнитного излучения микроволнового диапазона в виде слоя целлюлозной бумаги толщиной $d = 0.5$ мм при различных значениях воздушного зазора L , мм: 1 – 0; 2 – 0.25; 3 – 0.5; 4 – 1.0; 5 – 2.0; 6 – 3.0; 7 – 3.5; 8 – 4.5; 9 и 10 (S_{21}) – без целлюлозной бумаги (цвет онлайн)

Fig. 8. Frequency dependences of the reflection coefficient S_{11} in the first (a) and second (b) band gaps of an 11-layer photonic crystal with the interface layer in the form of absorber made of cellulose paper with a thickness of $d = 0.5$ mm for different values of the air gap L , mm: 1 – 0, 2 – 0.25, 3 – 0.5, 4 – 1.0, 5 – 2.0, 6 – 3.0, 7 – 3.5, 8 – 4.5, 9 and 10 (S_{21}) – in the absence of cellulose paper (color online)



ного кристалла приводит к смещению частоты таммовского резонанса в область более низких значений как в первой (рис. 8, а и 9, а), так и во второй (рис. 8, б и 9, б) запрещенных зонах.

Изменение частоты и амплитуды таммовских резонансов в первой и второй запрещенных

зонах с увеличением воздушного зазора между плёнкой и последним слоем фотонного кристалла представлены на рис. 10 и 11. Как следует из представленных результатов, с увеличением величины воздушного зазора наблюдается монотонное уменьшение частоты таммовских

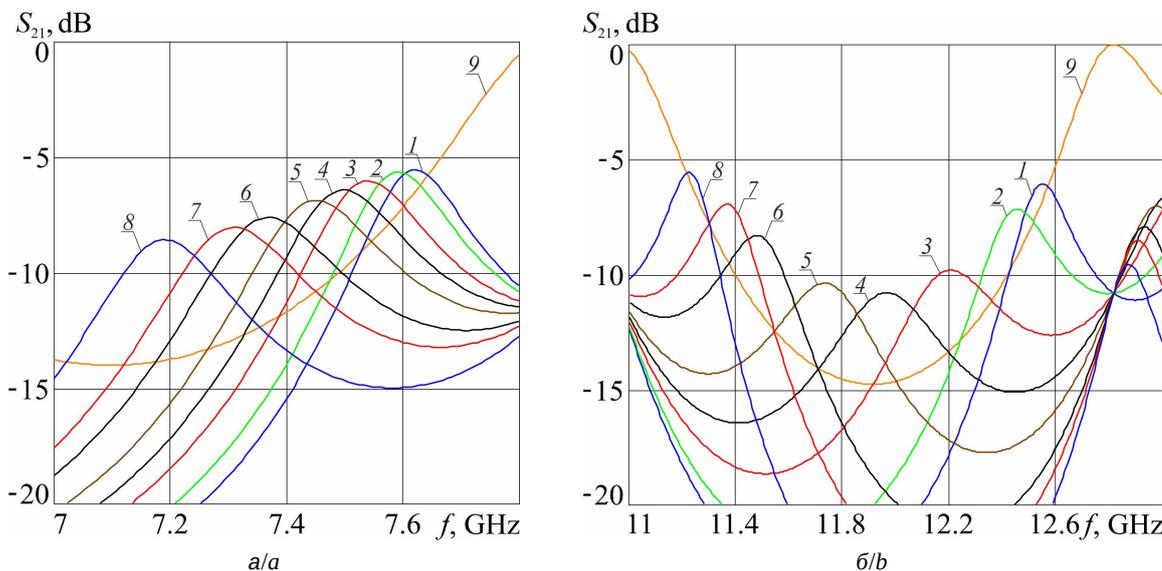


Рис. 9. Частотные зависимости коэффициента прохождения S_{21} в первой (а) и второй (б) запрещенных зонах 11-слойного фотонного кристалла при использовании в качестве интерфейса поглотителя электромагнитного излучения микроволнового диапазона в виде слоя дистиллированной воды толщиной $d = 0.5$ мм при различных значениях воздушного зазора L , мм: 1 – 0; 2 – 0.25; 3 – 0.5; 4 – 1.0; 5 – 2.0; 6 – 3.0; 7 – 3.5; 8 – 4.5; 9 – без целлюлозной бумаги (цвет онлайн)

Fig. 9. Frequency dependences of the transmission coefficient S_{21} in the first (a) and second (b) band gaps of an 11-layer photonic crystal with the interface layer in the form of absorber made of cellulose paper with a thickness of $d = 0.5$ mm for different values of the air gap L , mm: 1 – 0, 2 – 0.25, 3 – 0.5, 4 – 1.0, 5 – 2.0, 6 – 3.0, 7 – 3.5, 8 – 4.5, 9 – in the absence of cellulose paper (color online)

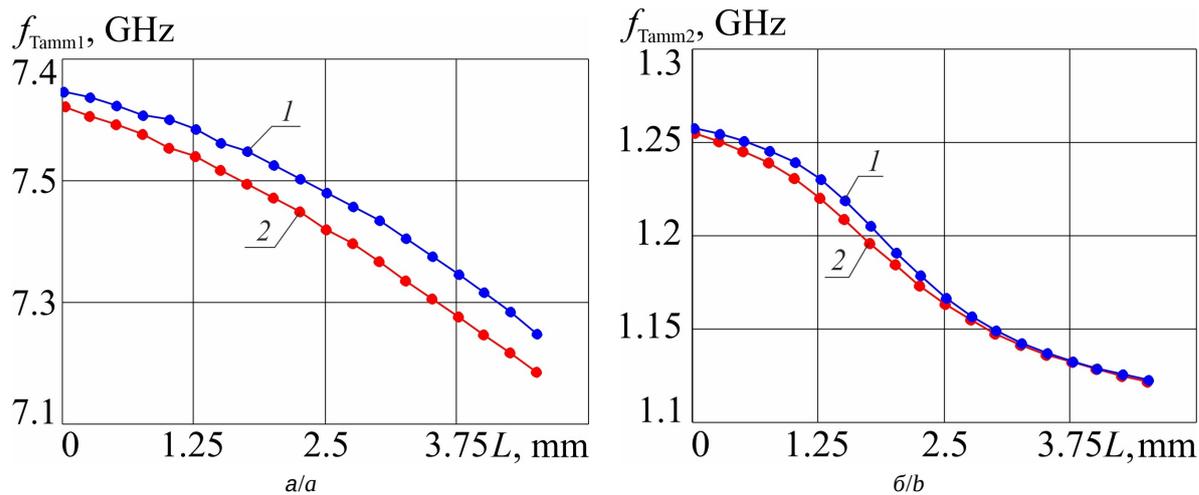


Рис. 10. Зависимости частоты таммовского резонанса f_{Tamm1} в первой (а) и f_{Tamm2} во второй (б) запрещенных зонах от величины воздушного зазора L между слоем целлюлозной бумаги и последним слоем фотонного кристалла. Массовая доля воды 51% (кривые 1) и 55% (кривые 2). $d = 0.5$ мм (цвет онлайн)

Fig. 10. Dependences of the Tamm resonance frequency f_{Tamm1} in the first (a) and f_{Tamm2} in the second (b) band gaps on the size of the air gap L between the cellulose paper layer and the last photonic layer. The mass fraction of water is 51% (curves 1) and 55% (curves 2). $d = 0.5$ mm (color online)



резонансов в первой и второй запрещённых зонах.

В то же время амплитуды коэффициентов отражения $S_{11\text{Tamm}}$ и прохождения $S_{21\text{Tamm}}$ таммовских резонансов с увеличением воздушного зазора L в диапазоне 0–5 мм изменяются монотонно в первой запрещённой зоне ($S_{11\text{Tamm}1}$ увели-

чивается, $S_{21\text{Tamm}1}$ уменьшается) и немонотонно во второй запрещённой зоне (при $L = 1.75$ мм величина $S_{11\text{Tamm}2}$ достигает максимального значения, $S_{21\text{Tamm}2}$ достигает минимального значения) (рис. 11). Это свидетельствует о возможности регулировки амплитуды таммовского резонанса посредством изменения величины L воздушно-

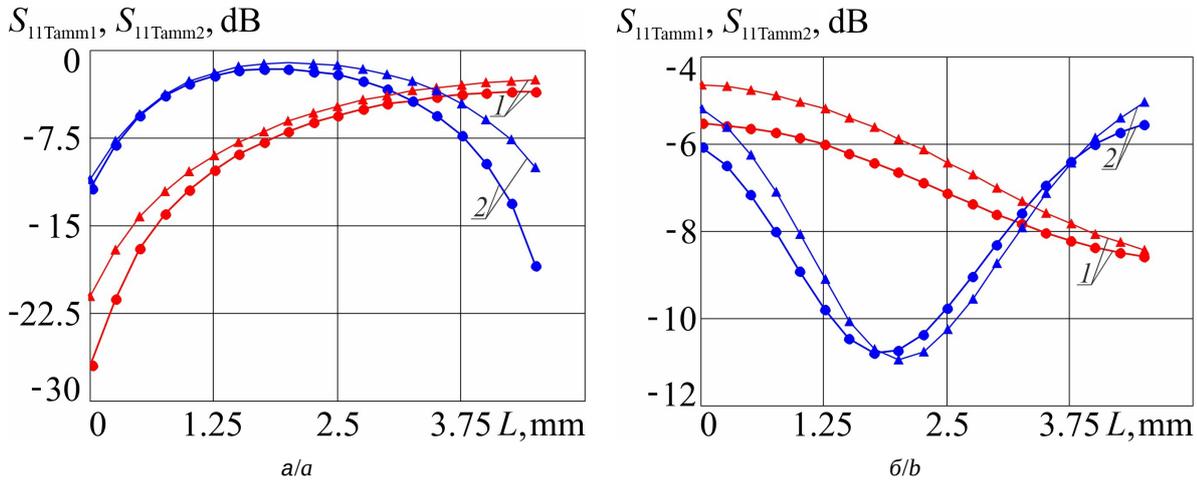


Рис. 11. Зависимости амплитуды коэффициентов отражения $S_{11\text{Tamm}1}$ и $S_{11\text{Tamm}2}$ (а) и прохождения $S_{21\text{Tamm}1}$ и $S_{21\text{Tamm}2}$ (б) таммовского резонанса в первой (кривые 1) и второй (кривые 2) запрещённых зонах от величины воздушного зазора L между слоем целлюлозной бумаги и последним слоем фотонного. Массовая доля воды 51% (треугольные метки) и 55% (круглые метки). $d = 0.5$ мм (цвет онлайн)

Fig. 11. Dependences of the amplitude of the reflection coefficients $S_{11\text{Tamm}1}$ and $S_{11\text{Tamm}2}$ (a) and transmission coefficients $S_{21\text{Tamm}1}$ and $S_{21\text{Tamm}2}$ (b) of the Tamm resonance in the first (curve 1) and second (curve 2) band gaps on the size of the air gap L between the cellulose paper layer and the last photonic layer. The mass fraction of water is 51% (triangular marks) and 55% (circle marks). $d = 0.5$ mm (color online)

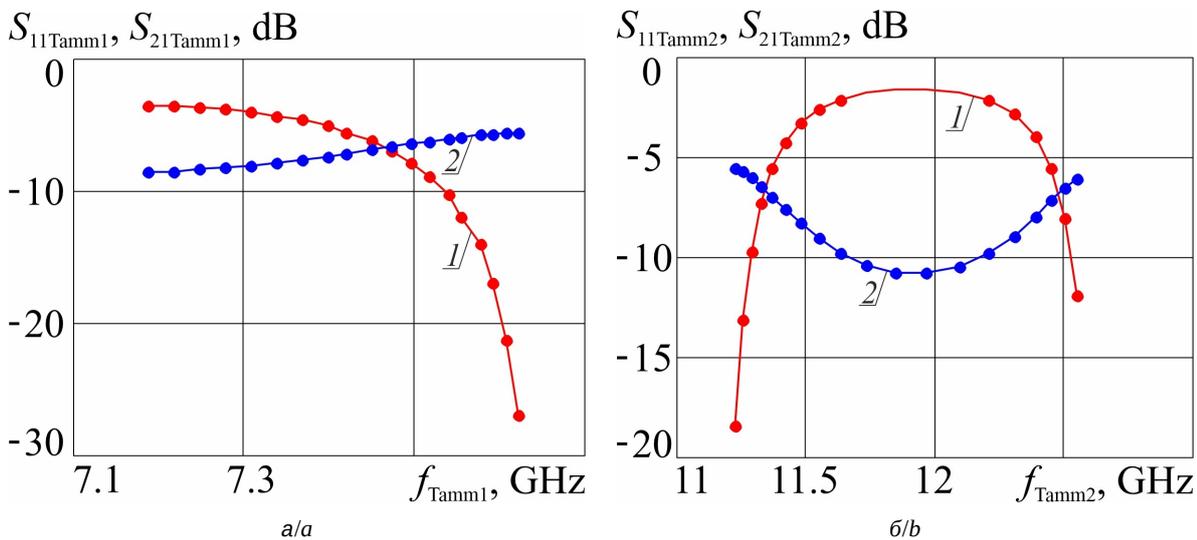


Рис. 12. Диаграммы амплитуда – частота таммовского резонанса $S_{11\text{Tamm}1}$ (кривая 1), $S_{21\text{Tamm}1}$ (кривая 2), $f_{\text{Tamm}1}$ в первой (а) и $S_{11\text{Tamm}2}$ (кривая 1), $S_{21\text{Tamm}2}$ (кривая 2), $f_{\text{Tamm}2}$ во второй (б) запрещённых зонах фотонного кристалла, каждая точка которой соответствует определённой величине L воздушного зазора. Массовая доля воды 55%. $d = 0.5$ мм (цвет онлайн)

Fig. 12. Amplitude – frequency diagrams of the Tamm resonance $S_{11\text{Tamm}1}$ (curve 1), $S_{21\text{Tamm}1}$ (curve 2), $f_{\text{Tamm}1}$ in the first (a) and $S_{11\text{Tamm}2}$ (curve 1), $S_{21\text{Tamm}2}$ (curve 2), $f_{\text{Tamm}2}$ in the second (b) band gaps of the photonic crystal, each point of which corresponds to a certain value L of the air gap. The mass fraction of water is 55%. $d = 0.5$ mm (color online)



го зазора при фиксированной толщине d слоя воды.

Характеристики фотонных таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах фотонного кристалла в зависимости от величины воздушного зазора представим в виде диаграммы в координатах «амплитуда – частота» (рис. 12). Эта диаграмма представляет «фазовый портрет таммовского резонанса», каждая точка которого соответствует определённой величине L воздушного зазора.

2. Результаты эксперимента и их обсуждение

Экспериментально исследовался одномерный фотонный кристалл, созданный в соответствии с описанной выше моделью. Измерения были выполнены с помощью векторного анализатора цепей Agilent PNA-X Network Analyzer N5242A в диапазоне частот 7–13 ГГц. Экспериментально было исследовано влияние толщины d слоя целлюлозной бумаги при массовой доле дистиллированной воды 55% на характеристики таммовского резонанса (рис. 13 и 14).

Как следует из результатов эксперимента, с ростом толщины целлюлозной бумаги при её малой толщине происходит уменьшение частоты $f_{\text{Тамм}}$ таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах (рис. 15). Дальнейшее увеличение толщины целлюлозной бумаги приводит к затухающим осцилляциям частоты таммовского резонанса.

В первой и второй запрещённых зонах при малых толщинах слоя целлюлозной бумаги наблюдается резкое изменение коэффициентов отражения и прохождения таммовских резонансов. При больших толщинах амплитуды осцилляций коэффициента отражения уменьшаются, а амплитуды коэффициентов прохождения монотонно убывают со скоростью, зависящей от толщины слоя (рис. 16). Изменение этих характеристик в зависимости от ширины зазора L отражено на рис. 17 и 18.

Управление частотой и амплитудой таммовских резонансов, основываясь на результатах компьютерного моделирования, достигалось изменением структуры интерфейса с помощью введения воздушного зазора между фотонным кри-

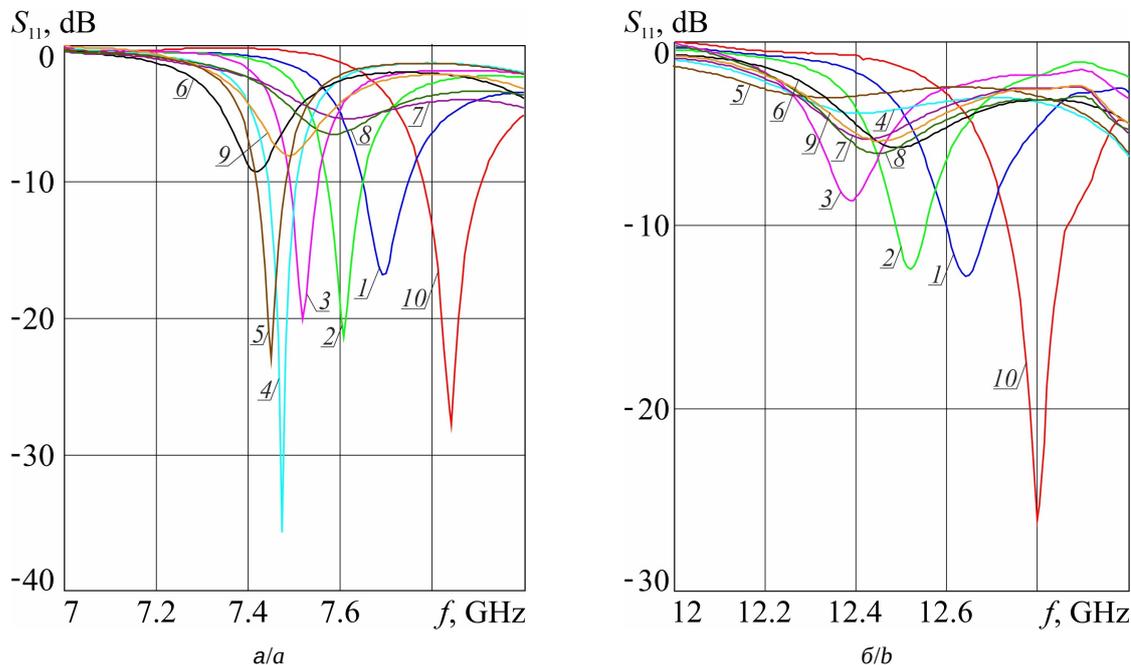


Рис. 13. Экспериментальные частотные зависимости коэффициента отражения S_{11} в первой (а) и второй (б) запрещённых зонах 11-слойного фотонного кристалла при использовании в качестве интерфейса поглотителя электромагнитного излучения микроволнового диапазона в виде целлюлозной бумаги при фиксированной массовой доле дистиллированной воды 55% для различной толщины d , мм: 1 – 0.34; 2 – 0.56; 3 – 1.15; 4 – 1.79; 5 – 2.0; 6 – 2.2; 7 – 3.83; 8 – 4.7; 9 – 5.6; 10 – без целлюлозной бумаги. $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)

Fig. 13. Experimental frequency dependences of the reflection coefficient S_{11} in the first (a) and second (b) band gaps of an 11-layer photonic crystal with the interface layer in the form of absorber made of cellulose paper at a fixed mass fraction of distilled water $X = 55\%$ for different thicknesses d , mm: 1 – 0.34, 2 – 0.56, 3 – 1.15, 4 – 1.79, 5 – 2.0, 6 – 2.2, 7 – 3.83, 8 – 4.7, 9 – 5.6, and 10 – in the absence of cellulose paper. $L = 0.0$ mm (color online)

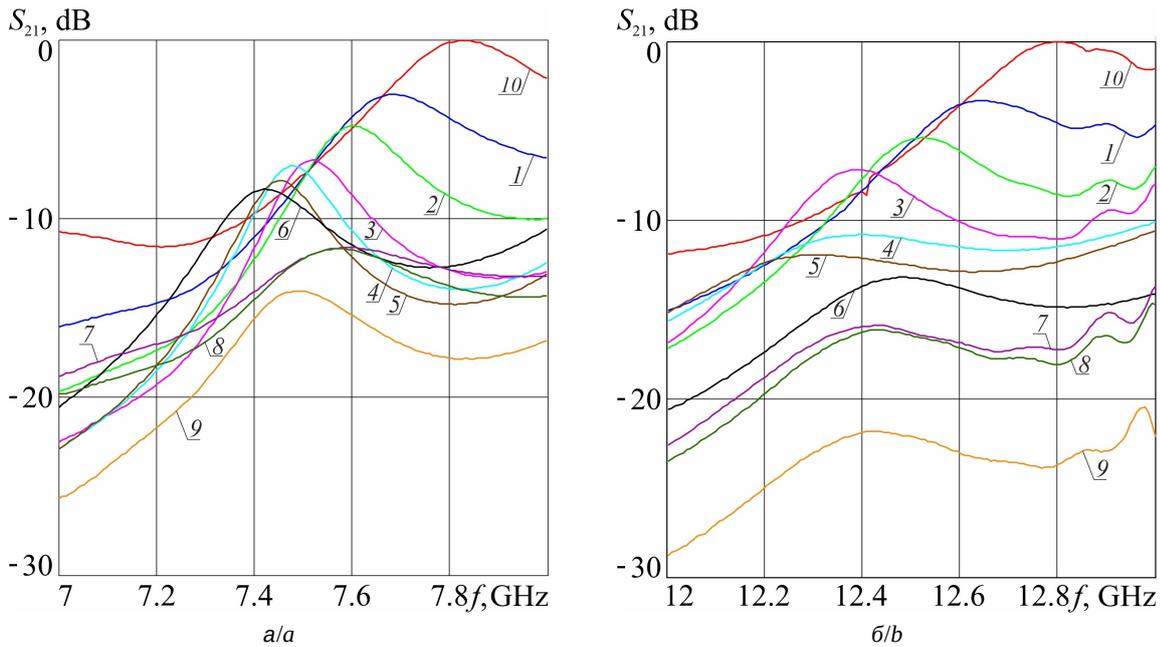


Рис. 14. Экспериментальные частотные зависимости коэффициента прохождения S_{21} в первой (а) и второй (б) запрещённых зонах 11-слойного фотонного кристалла при использовании в качестве интерфейса поглотителя электромагнитного излучения микроволнового диапазона в виде целлюлозной бумаги при фиксированной массовой доле дистиллированной воды 55% для различной толщины d , мм: 1 – 0.34; 2 – 0.56; 3 – 1.15; 4 – 1.79; 5 – 2.0; 6 – 2.2; 7 – 3.83; 8 – 4.7; 9 – 5.6; 10 – без целлюлозной бумаги; $L = 0.0$ мм (цвет онлайн)

Fig. 14. Experimental frequency dependences of the transmission coefficient S_{21} in the first (a) and second (b) band gaps of an 11-layer photonic crystal with the interface layer in the form of absorber made of cellulose paper at a fixed mass fraction of distilled water $X = 55\%$ for different thicknesses d , mm: 1 – 0.34, 2 – 0.56, 3 – 1.15, 4 – 1.79, 5 – 2.0, 6 – 2.2, 7 – 3.83, 8 – 4.7, 9 – 5.6, and 10 – in the absence of cellulose paper. $L = 0.0$ mm (color online)

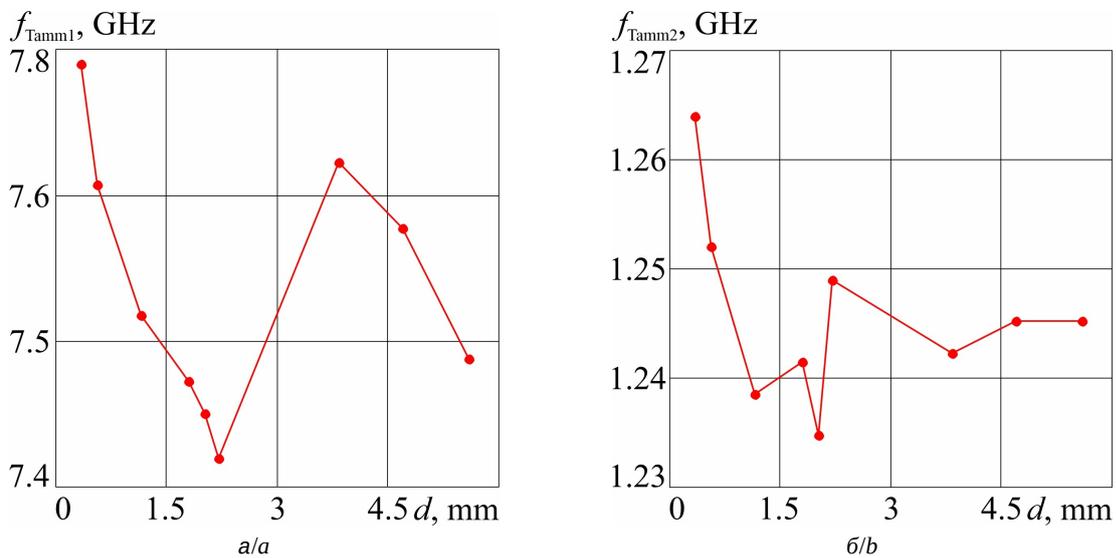


Рис. 15. Зависимости частоты таммовского резонанса в первой f_{Tamm1} (а) и второй f_{Tamm2} (б) запрещённых зонах от толщины слоя целлюлозной бумаги

Fig. 15. Dependences of the Tamm resonance frequency in the first f_{Tamm1} (a) and second f_{Tamm2} (b) band gaps on the thickness of the cellulose paper layer

сталлом и слоем целлюлозной бумаги с фиксированной массовой долей дистиллированной воды.

Воздушный зазор в эксперименте создавался с помощью расположения между фотонным

кристаллом и слоем целлюлозной бумаги тонких металлических диафрагм, разной толщины, с отверстием равным сечению волновода, использованного при создании фотонного кристалла.

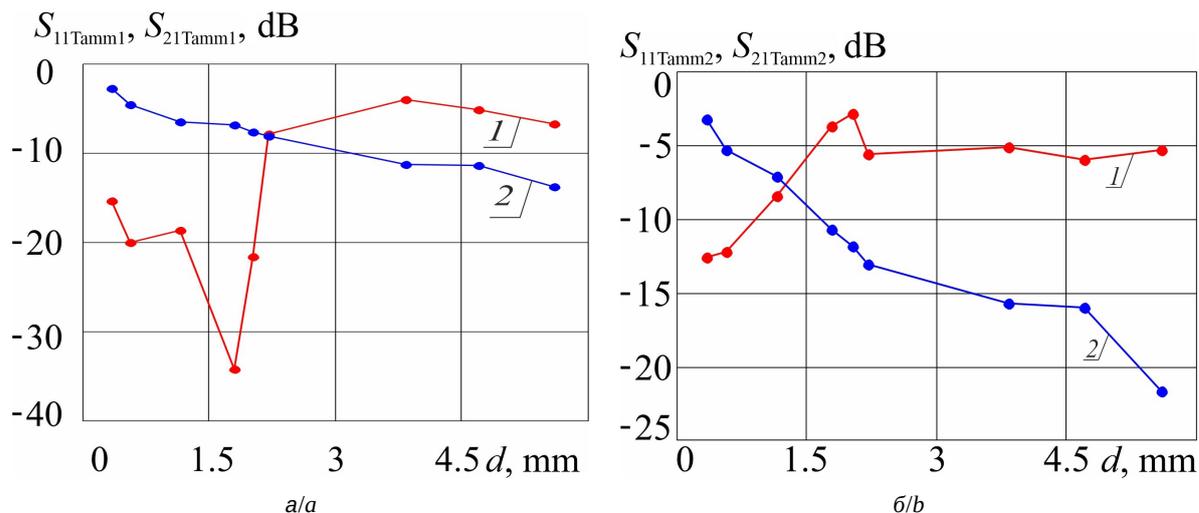


Рис. 16. Зависимости амплитуд коэффициентов отражения S_{11} (кривые 1) и прохождения S_{12} (кривые 2) таммовского резонанса в первой (а) и второй (б) запрещённых зонах от толщины слоя целлюлозной бумаги (цвет онлайн)

Fig. 16. Dependences of the amplitudes of the reflection coefficients S_{11} (curves 1) and transmission coefficients S_{12} (curves 2) of the Tamm resonance in the first (a) and second (b) band gaps on the thickness of the cellulose paper layer (color online)

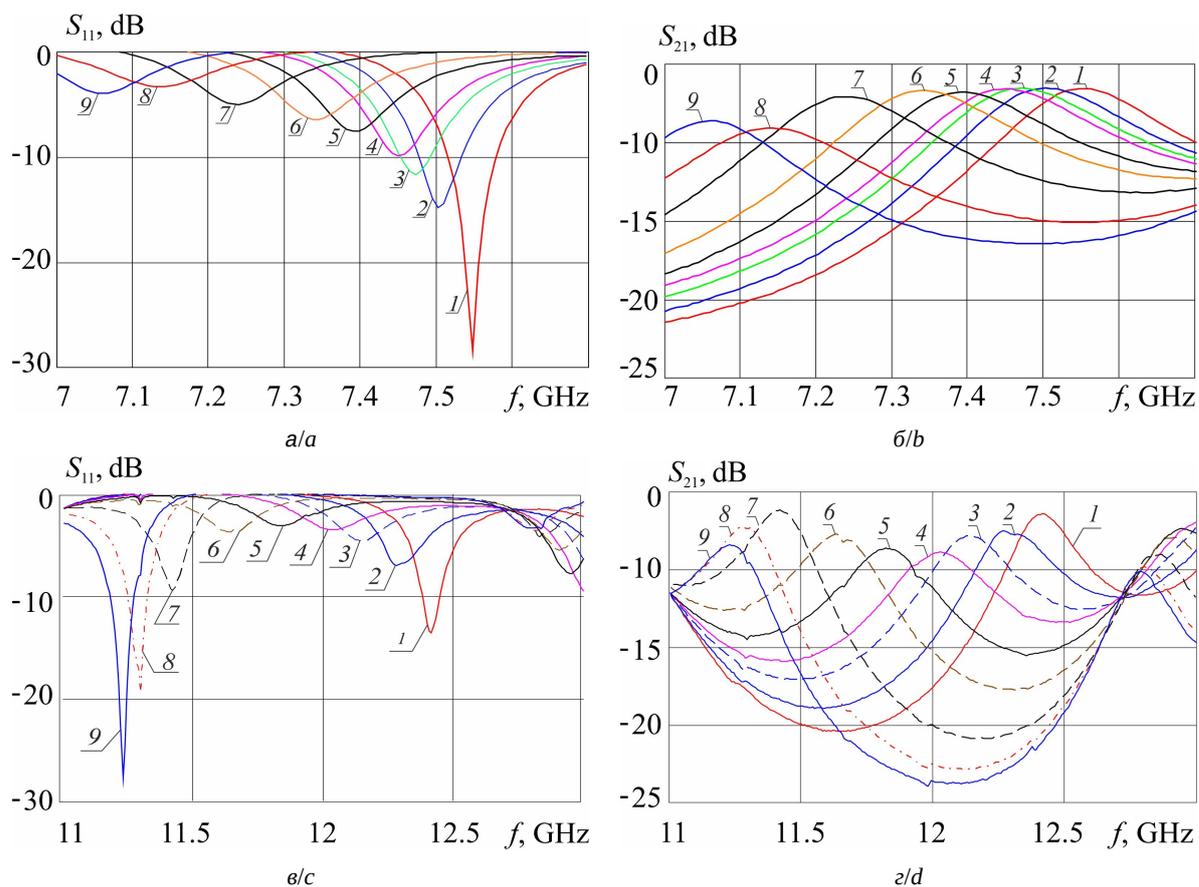


Рис. 17. Экспериментальные частотные зависимости коэффициентов отражения S_{11} и коэффициентов прохождения S_{21} в первой (а, б) и второй (в, г) запрещённых зонах при использовании в качестве интерфейса слоя целлюлозы толщиной $d = 0.5$ мм при различных значениях зазора L , мм: 1 – 0; 2 – 0.5; 3 – 0.9; 4 – 1.4; 5 – 1.9; 6 – 2.43; 7 – 3.4; 8 – 4.3; 9 – 4.9 (цвет онлайн)

Fig. 17. Experimental frequency dependences of the reflection coefficients S_{11} and transmission coefficients S_{21} in the first (a, b) and second (c, d) band gaps when using a cellulose layer with a thickness of $d = 0.5$ mm as an interface for different values of the gap L , mm: 1 – 0; 2 – 0.5; 3 – 0.9; 4 – 1.4; 5 – 1.9; 6 – 2.43; 7 – 3.4; 8 – 4.3; 9 – 4.9 (color online)

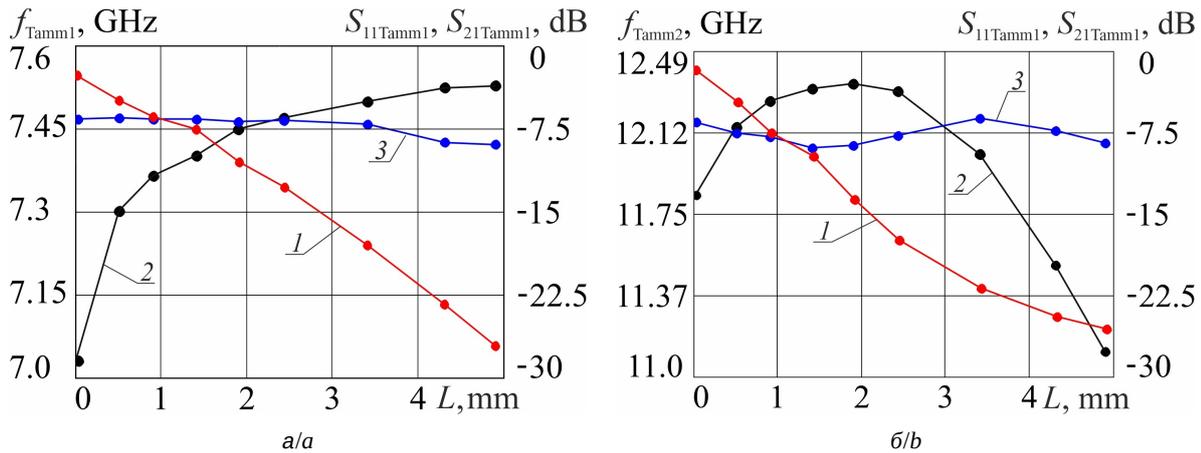


Рис. 18. Зависимости частот f_{Tamm1} и f_{Tamm2} (кривые 1), амплитуды коэффициента отражения S_{11} (кривые 2) и прохождения S_{12} (кривые 3) таммовского резонанса в первой (а) и во второй (б) запрещённых зонах от величины зазора (цвет онлайн)

Fig. 18. Dependences of the frequencies f_{Tamm1} and f_{Tamm2} (curves 1), the amplitude of the reflection coefficient S_{11} (curves 2) and the transmission S_{12} (curves 3) of the Tamm resonance in the first (a) and second (b) band gaps on the gap size (color online)

Как следует из результатов эксперимента АЧХ фотонного кристалла, представленных на рис. 17, увеличение воздушного зазора L между слоем целлюлозной бумаги и последним слоем фотонного кристалла приводит к смещению частоты таммовского резонанса в область более низких значений как в первой, так и во второй запрещённых зонах.

Изменение частоты и амплитуды таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах с увеличением воздушного зазора между плёнкой и последним слоем фотонного кристалла представлены на рис. 18. С увеличением величины воздушного зазора наблюдается монотонное уменьшение частоты таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах. В то же время изменения амплитуд таммовских резонансов в первой зоне монотонны, а во второй – немонотонны. Следует отметить, при значительном уменьшении массовой доли полярной жидкости в целлюлозной бумаге немонотонность изменения амплитуд резонансов во второй запрещённой зоне исчезает.

Можно сделать вывод, что регулировка величины воздушного зазора позволяет управлять амплитудой таммовских резонансов. При этом для каждой фиксированной толщины слоя целлюлозы с определённой массовой долей дистиллированной воды для достижения максимальной амплитуды таммовского резонанса следует выбрать определённую величину воздушного зазора.

Заключение

В работе рассмотрены особенности возникновения фотонных таммовских резонансов в запрещённых зонах одномерной брэгговской структуры СВЧ-диапазона при использовании в качестве интерфейса фотонного кристалла водосодержащей структуры – элемента «зелёной электроники», обладающего свойствами поглотителя СВЧ-энергии.

Показано, что амплитуда и частота таммовских резонансов регулируется толщиной слоя целлюлозы, массовой долей дистиллированной воды и толщиной воздушного зазора между фотонным кристаллом и слоем целлюлозы. Последнее обеспечивает достижение высокой чувствительности таммовского резонанса к изменению как толщины слоя целлюлозы, так и массовой доли дистиллированной воды в этом слое.

Установлено, что увеличение толщины целлюлозной бумаги, содержащей дистиллированную воду при её массовой доле более 51%, приводит к затухающим осцилляциям частоты и амплитуды таммовского резонанса. С увеличением воздушного зазора наблюдается монотонное уменьшение частоты таммовских резонансов в первой и второй запрещённых зонах.

Экспериментальные данные подтверждают результаты расчетов и демонстрируют эффект возникновения фотонных таммовских состояний в запрещённой зоне при использовании в качестве интерфейса водосодержащей структуры в виде слоя целлюлозы с фиксированной массовой долей дистиллированной воды.



Разработанная методика расчетов и изменений может применяться, в частности, как при конструировании перестраиваемых фильтров и аттенуаторов, использующих в качестве поглотителя структуры на основе целлюлозной бумаги, так и характеристики искусственно создаваемых материалов на основе целлюлозы и её производных с различными видами включений – от непроводящих диэлектриков в виде дистиллированной воды до проводящих включений в виде нанотрубок.

Список литературы / References

- Rybin M. V., Limonov M. F. Resonance effects in photonic crystals and metamaterials. *Phys. Usp.*, 2019, vol. 62, no. 8, pp. 823–838. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2019.03.038543>
- Tolmachev V. A. Optical properties of one-dimensional photonic crystals obtained by micromatching silicon (A review). *Opt. Spectrosc.*, 2017, vol. 122, no. 4, pp. 646–660. <https://doi.org/10.1134/S0030400X17030201>
- Sibilia C., Benson T. M., Marciniak M., Szoplik T., eds. *Photonic Crystals: Physics and Technology*. Milan, Springer, 2008. 284 p. <https://doi.org/10.1007/978-88-470-0844-1>
- Usanov D. A., Nikitov S. A., Skripal A. V., Ponomarev D. V. *One-dimensional Microwave Photonic Crystals: New Applications*. Boca Raton, CRC Press, 2019. 154 p. <https://doi.org/10.1201/9780429276231>
- Skripal A. V., Ponomarev D. V., Komarov A. A. Tamm resonances in the structure 1-D microwave photonic crystal/conducting nanometer layer. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 2020, vol. 68, iss. 12, pp. 5115–5122. <https://doi.org/10.1109/TMTT.2020.3021412>
- Skripal A. V., Ponomarev D. V., Komarov A. A., Sharonov V. E. Tamm resonances control in one-dimensional microwave photonic crystal for measuring parameters of heavily doped semiconductor layers. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2022, vol. 22, iss. 2, pp. 123–130 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-2-123-130>
- Sato T., Buchner R. Dielectric relaxation processes in ethanol/water mixtures. *J. Phys. Chem. A*, 2004, vol. 108, iss. 23, pp. 5007–5015. <https://doi.org/10.1021/jp035255o>
- Meissner T., Wentz F. J. The complex dielectric constant of pure and sea water from microwave satellite observations. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2004, vol. 42, no. 9, pp. 1836–1849. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2004.831888>
- Wen J., Zhao Q., Peng R., Yao H., Qing Y., Yin J., Ren Q. Progress in water-based metamaterial absorbers: A review. *Optical Materials Express*, 2022, vol. 12, no. 4, pp. 1461–1479. <https://doi.org/10.1364/OME.455723>
- Yoo Y. J., Ju S., Park S. Y., Kim Y. Ju., Bong J., Lim T., Kim K. W., Rhee J. Y., Lee Y. Metamaterial absorber for electromagnetic waves in periodic water droplets. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, no. 1, art. 14018. <https://doi.org/10.1038/srep14018>
- He F., Si K., Zha D., Li R., Zhang Yu., Dong J., Miao L., Bie Sh., Jiang J. Broadband microwave absorption properties of a frequency-selective surface embedded in a patterned honeycomb absorber. *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, 2021, vol. 63, iss. 4, pp. 1290–1294. <https://doi.org/10.1109/TEMC.2021.3050184>
- Kuzhir P. P., Paddubskaya A. G., Volynets N. I., Batrakov K. G., Kaplas T., Lamberti P., Kotsilkova R., Lambin P. Main principles of passive devices based on graphene and carbon films in microwave – THz frequency range. *J. Nanophoton.*, 2017, vol. 11, no. 3, art. 032504. <https://doi.org/10.1117/1.JNP.11.032504>
- Zheng J., Zheng H., Pang Y., Qu B., Xu Z. Transparent broadband absorber based on a multilayer ITO conductive film. *Optics Express*, 2023, vol. 31, no. 3, pp. 3731–3742. <https://doi.org/10.1364/OE.482992>
- Bogatskaya A. V., Klenov N. V., Nikiforova P. M., Popov A. M., Schegolev A. E. Features of propagation and absorption of electromagnetic signals in periodic structures of conducting and dielectric layers. *Opt. Spectrosc.*, 2022, vol. 130, no. 4, pp. 481–487 (in Russian). <https://doi.org/10.21883/OS.2022.04.52259.48-21>
- Skripal A. V., Ponomarev D. V., Volshanik M. A. Resonances in microwave photonic crystals using a continuous layer of water as an interface. *Technical Physics Letters*, 2024, iss. 8, pp. 26–29. <https://doi.org/10.61011/PJTF.2024.15.58437.19880>
- Skripal A. V., Ponomarev D. V., Volshanik M. A. Control of resonances in a one-dimensional bragg structure of the microwave range using a distilled water layer as an interface. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 4, pp. 398–411 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-4-398-411>
- Jose S. A., Cowan N., Davidson M., Godina G., Smith I., Xin J., Menezes P. L. A comprehensive review on cellulose nanofibers, nanomaterials, and composites: Manufacturing, properties, and applications. *Nanomaterials*, 2025, vol. 15, iss. 5, art. 356. <https://doi.org/10.3390/nano15050356>
- Song S., Li H., Liu P., Peng X. Applications of cellulose-based composites and their derivatives for microwave absorption and electromagnetic shielding. *Carbohydr. Polym.*, 2022, vol. 287, art. 119347. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.119347>
- Chen Y., Pang L., Li Y., Luo H., Duan G., Mei C., Xu W., Zhou W., Liu K., Jiang S. Ultra-thin and highly flexible cellulose nanofiber/silver nanowire conductive paper for effective electromagnetic interference shielding. *Composites Part A*, 2020, vol. 135, art. 105960. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2020.105960>
- Lee T. W., Lee S. E., Jeong Y. G. Highly effective electromagnetic interference shielding materials based on silver nanowire/cellulose papers. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016, vol. 8, iss. 20, pp. 13123–13132. <https://doi.org/10.1021/acsami.6b02218>
- Wu L. P., Li Y. Z., Wang B. J., Mao Z. P., Xu H., Zhong Y., Zhang L., Sui X. Electroless Ag-plated



- sponges by tunable deposition onto cellulose-derived templates for ultra-high electromagnetic interference shielding. *Mater. Des.*, 2018, vol. 159, pp. 47–56. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.08.037>
22. Usanov D. A., Skripal A. V., Abramov A. V., Bogolyubov A. S. Determination of the metal nanometer layer thickness and semiconductor conductivity in metal-semiconductor structures from electromagnetic reflection and transmission spectra. *Technical Physics*, 2006, vol. 51, no. 5, pp. 644–649. <https://doi.org/10.1134/S1063784206050173>
23. Fan S., Yanik M. F., Wang Z., Sandhu S., Povinelli M. L. Advances in theory of photonic crystals. *Journal of Lightwave Technology*, 2006, vol. 24, no. 12, pp. 4493–4501. <https://doi.org/10.1109/JLT.2006.886061>
24. Nikitin A. A., Nikitin A. A., Ustinov A. B., Kalinikos B. A., Lähderanta E. Microwave photonic crystal on the slot transmission line with a ferroelectric film. *Technical Physics*, 2016, vol. 61, no. 6, pp. 913–918. <https://doi.org/10.1134/S106378421606013X>
25. *Agilent 85071E Materials Measurement Software. Technical Overview*. Available at: <https://hibp.ecse.rpi.edu/~connor/RF/Antenna%20Disk%20from%20Electrorent/Materials%20Measurements/85071E%20overview%205988-9472EN.pdf> (accessed December 24, 2025).

Поступила в редакцию 09.10.2025; одобрена после рецензирования 16.12.2025;
принята к публикации 19.12.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 09.10.2025; approved after reviewing 16.12.2025;
accepted for publication 19.12.2025; published 31.03.2026



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 19–30
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 19–30
<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-19-30>, EDN: CPXIFD

Научная статья
УДК 517.938:530.182



Четыре сценария перехода к спайковой активности в новой модели нейрона

В. П. Еремеев, Г. В. Осипов✉

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Россия, 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23

Еремеев Владимир Петрович, магистрант кафедры теории управления и динамики систем, eremeev-03@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0004-6167-5041>

Осипов Григорий Владимирович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой теории управления и динамики систем, grosipov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2841-8399>, AuthorID: 19695

Аннотация. В работе представлена новая двумерная модель нейрона, описывающая переход от состояния покоя к режиму регулярной спайковой активности. Предложенная система уравнений включает одну быструю и одну медленную переменную и позволяет в едином параметрическом пространстве воспроизвести четыре ключевых сценария возбуждения, известных в теории динамических систем. Проведён аналитический и численный бифуркационный анализ поведения системы. Показано, что при изменении параметров система реализует бифуркацию Андронова–Хопфа, бифуркацию инвариантной кривой седло-узла, гомоклиническую бифуркацию и бифуркацию двукратного предельного цикла. Каждый из сценариев сопровождается изменением топологии фазовых траекторий и характером перехода от стационарного состояния к устойчивому предельному циклу, что определяет различные типы нейронного возбуждения. Для каждого механизма перехода приведены фазовые портреты и временные реализации, демонстрирующие динамику переменных модели вблизи критических значений параметров.

Ключевые слова: нейронная модель, бифуркационный анализ, спайковая активность, предельный цикл, бифуркация Андронова–Хопфа, бифуркация двукратного предельного цикла, гомоклиническая бифуркация, бифуркация инвариантной кривой седло-узла

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 22-12-00348-П).

Для цитирования: Еремеев В. П., Осипов Г. В. Четыре сценария перехода к спайковой активности в новой модели нейрона // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 19–30. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-19-30>, EDN: CPXIFD

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

Article

Four scenarios for the transition to spiking activity in a new neuron model

V. P. Ereemeev, G. V. Osipov✉

National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 23 Gagarin Avenue, Nizhny Novgorod 603950, Russia

Vladimir P. Ereemeev, eremeev-03@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0004-6167-5041>

Grigory V. Osipov, grosipov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2841-8399>, AuthorID: 19695

Abstract. Background and Objectives: Understanding the mechanisms underlying the generation of spike activity in neurons is a central problem of modern theoretical neuroscience. Neurons encode and transmit information through short electrical impulses, and transitions from the resting state to periodic spiking are governed by distinct bifurcation mechanisms. Although several mathematical neuron models have been developed – such as the Hodgkin-Huxley, FitzHugh-Nagumo, Morris-Lecar, and Izhikevich models – most of them reproduce only a limited subset of bifurcation scenarios or are too complex for detailed qualitative analysis. The object of this study is a novel two-dimensional neuron model that, despite its minimal form, reproduces all four classical scenarios of transition from rest to spiking activity known in the theory of dynamical systems. The purpose of this work is to identify and describe these mechanisms analytically and numerically, and to demonstrate the correspondence between the model's phase-space structures and distinct types of neuronal excitability. **Materials and Methods:** The model is formulated as a system of two coupled nonlinear differential equations with one fast and one slow variable. Analytical investigation of equilibrium states and their stability was performed by examining the Jacobian matrix. The bifurcation structure was explored using continuation methods and parametric analysis on the (b, k) plane, revealing the boundaries of qualitative transitions between dynamical regimes. Numerical integration of the system and phase-plane visualization were conducted to confirm the theoretical predictions and illustrate the phase portraits, trajectories, and time series corresponding to each scenario. **Results:** The analysis has revealed four distinct bifurcation mechanisms responsible for the onset of spiking activity: (1) the



Andronov-Hopf bifurcation, where a stable equilibrium loses stability and a small-amplitude limit cycle emerges; (2) the saddle-node on invariant circle (SNIC) bifurcation, characterized by the merging of a saddle and a node on a closed trajectory leading to low-frequency oscillations; (3) the homoclinic bifurcation, associated with the reconnection of a saddle separatrix and the generation of large-period oscillations; and (4) the fold bifurcation of two limit cycles, in which a stable and an unstable cycle collide and disappear. Each mechanism corresponds to a specific type of neuronal excitability, determining the threshold and the temporal structure of spike generation. The constructed bifurcation diagram in the parameter plane clearly separates the domains corresponding to steady, periodic, and bistable dynamics. **Conclusion:** The proposed minimal neuron model successfully unifies four key bifurcation scenarios within a single framework, combining analytical tractability with rich dynamical behavior. Such universality makes it a convenient tool for studying transitions between quiescent and oscillatory activity, as well as for modeling hybrid networks of neurons with diverse excitability types. The results contribute to the theoretical understanding of neuronal dynamics and can serve as a foundation for the development of reduced models of biological neurons and for the analysis of collective activity in neural ensembles.

Keywords: neuron model, bifurcation analysis, spiking activity, limit cycle, Andronov–Hopf bifurcation, fold of two limit cycles, homoclinic bifurcation, saddle-node on invariant circle bifurcation

Acknowledgements: This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. 22-12-00348-П).

For citation: Eremeev V. P., Osipov G. V. Four scenarios for the transition to spiking activity in a new neuron model. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 19–30 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-19-30>, EDN: CPXIFD

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

Введение

Нейронные сети головного мозга отвечают за выполнение сложных когнитивных функций, таких как восприятие и принятие решений [1, 2]. Основным способом передачи информации между нейронами являются короткие электрические импульсы (спайки) [3], поэтому понимание механизмов перехода одиночного нейрона в режим регулярной спайковой активности имеет фундаментальное значение для нейрофизиологии и моделей искусственных сетей [4].

Существует множество математических моделей нейронной активности, однако большинство из них либо избыточно сложны для детального бифуркационного анализа, либо воспроизводят лишь ограниченный набор динамических режимов. В связи с этим актуальна разработка упрощённых моделей, доступных для качественного исследования, но при этом способных отражать основные сценарии бифуркационных переходов [5, 6].

Так, модель Ходжкина–Хаксли [7] включает четыре нелинейных уравнения и восемь параметров, обеспечивая детальное воспроизведение ионных токов, но затрудняя качественный анализ. Упрощённая модель Фитцхью–Нагумо [8], модель Морриса–Лекара [9] и модель Ижикевича [10] состоят из двух уравнений и демонстрируют лишь некоторые бифуркации, ограничивая спектр возможных переходов. Это определяет необходимость ещё более минималистичного формата, способного охватить все четыре ключевых механизма перехода к спайковой активности.

В настоящей работе предложена двумерная модель с одной быстрой и одной медленной

переменными, позволяющая воспроизвести четыре характерных сценария перехода от режима покоя к спайковой активности – в фазовом пространстве рассматриваемой системы рождается устойчивый предельный цикл: бифуркацию Андронова–Хопфа, бифуркацию инвариантной кривой седло-узла, гомоклиническую бифуркацию и бифуркацию двукратного предельного цикла. В работе определены и описаны эти сценарии с помощью аналитических и численных методов, а также проиллюстрированы фазовыми портретами и временными реализациями.

1. Математическая модель

1.1. Уравнения модели

Предлагается двумерная модель нейрона с «быстрой» переменной x и «медленной» переменной y :

$$\begin{cases} \mu \dot{x} = -2e^{-x} + e^{-2x} + y, \\ \dot{y} = -x + ky + b, \end{cases} \quad (1)$$

где x – быстрое динамическое состояние (аналог мембранного потенциала); y – медленная переменная восстановления; $\mu > 0$ – малый параметр, задающий разделение временных шкал ($\mu \ll 1$); k, b – бифуркационные параметры.

Функциональная форма нелинейности в уравнении (1) выбрана так, чтобы обеспечить наличие нескольких критических точек и выразительные бифуркационные переходы при изменении параметров b и k . Экспоненциальные члены e^{-x} и e^{-2x} моделируют быстрое «выключение» мембранных токов при больших значениях x , а линейная зависимость от y добавляет медленный восстановительный компонент. Такая



комбинированная структура позволяет системе демонстрировать широкий набор динамических режимов при минимальном числе параметров и фазовых переменных.

Во всех численных расчётах модели принималось $\mu = 0.01$, что обеспечивает чёткое разделение временных масштабов.

1.2. Расположение изоклин

При фиксированном малом значении параметра μ проводится детальный анализ состояний равновесия и предельных циклов в зависимости от параметров b и k . Устойчивые состояния равновесия соответствуют режиму покоя нейрона, а устойчивые предельные циклы соответствуют режиму периодической спайковой активности. Особое внимание в работе уделено изучению бифуркаций, приводящих к возникновению устойчивых предельных циклов. Для наглядной классификации характера стационар-

ных точек системы при различных параметрах b и фиксированном k используются следующие графические обозначения: устойчивые состояния равновесия (устойчивые узлы или фокусы) – чёрный круг ●; неустойчивые состояния равновесия (неустойчивые узлы или фокусы) – белый круг ○ с чёрным контуром; седло-узловые точки – круг наполовину чёрный, наполовину белый ◐; седловые точки – ⊗ круг с крестиком внутри.

На рис. 1 представлены графики изоклин системы (1) и указаны состояния равновесия для положительного угла наклона прямой – изоклины вертикальных наклонов векторного поля системы (1) для различных значений параметра b . В зависимости от значения b имеет место различное количество и тип состояний равновесия. Значения b выбраны так, что для каждой пары (b, k) реализуется своя, отличная от других, топология поведения фазовых траекторий.

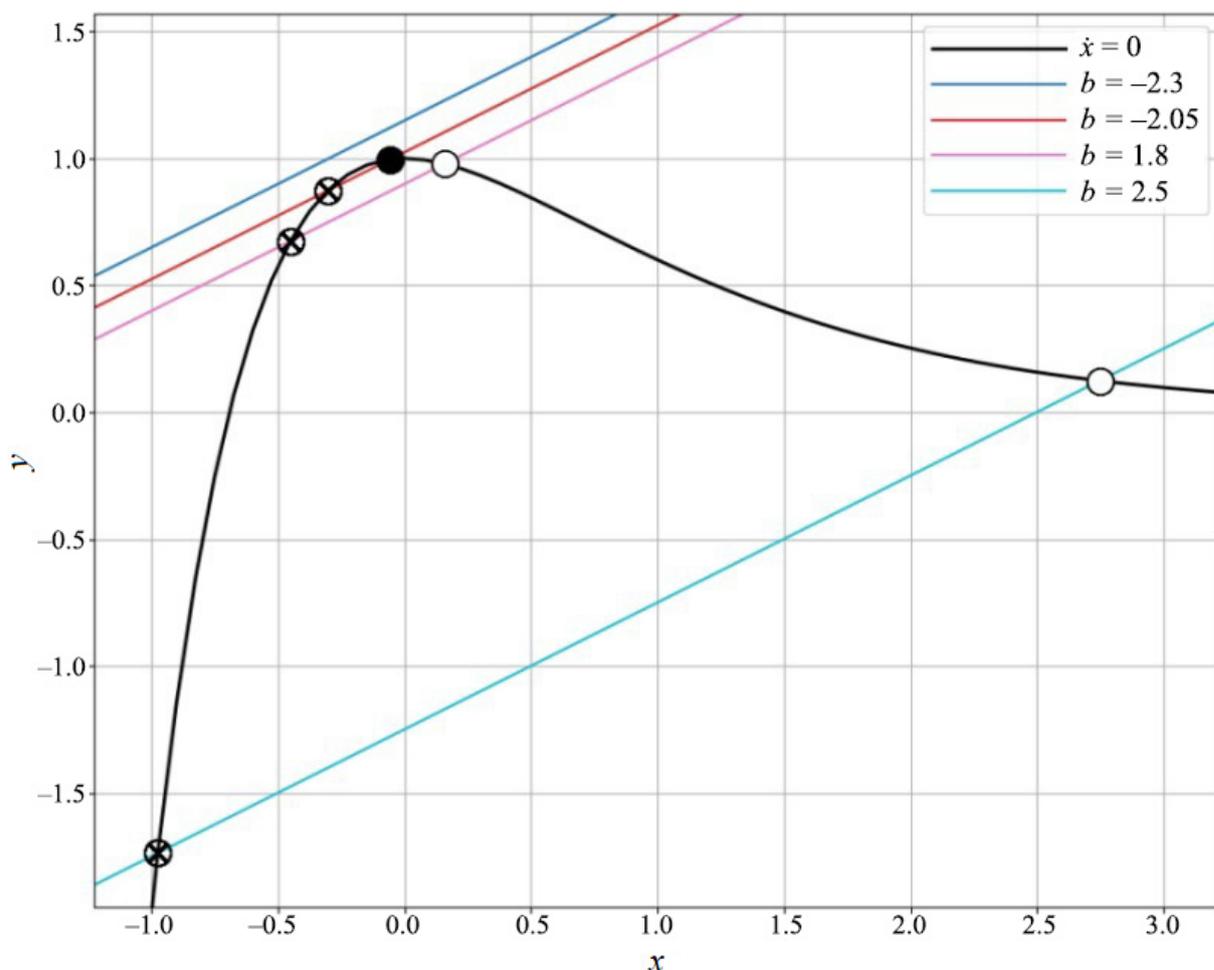


Рис. 1. Графики изоклин вертикальных наклонов при $k = 2$ (цвет онлайн)

Fig. 1. Plots of vertical-slope isoclines for $k = 2$ (color online)



Для $k = 2$ и различных выделенных значений b число и типы стационарных решений системы (1) следующие:

при $b = -2.3$ состояний равновесия нет;

при $b = -2.05$ – два состояния равновесия (седло и устойчивый фокус);

при $b = -1.8$ – два состояния равновесия (седло и неустойчивый фокус);

при $b = 2.5$ – два состояния равновесия (седло и неустойчивый фокус), автоколебания.

Из приведенного перечисления видно, что в зависимости от значения параметра b возможна существенная эволюция динамики системы (1). Сделаем детальный анализ происходящих в рассматриваемой системе перестроек фазового портрета.

2. Бифуркационный анализ

2.1. Бифуркационная диаграмма

Бифуркационная диаграмма системы на плоскости параметров (b, k) дана рис. 2. Типы областей бифуркационной диаграммы охарактеризованы в табл. 1. Области и их границы обозначены символами G_i и l_i соответственно ($i = 1, 2, \dots, 10$).

2.1. Бифуркационные кривые

В табл. 2 перечислены все бифуркационные кривые l_i , разделяющие области G_i на плоскости

параметров (b, k) , и указаны их типы. Эти кривые соответствуют переходам между разными режимами возбудимой и спайковой активности в модели.

3. Сценарии перехода к спайковой активности

В этом разделе даются обобщенные характеристики каждого сценария возникновения периодической спайковой активности, представлены фазовые портреты в двух состояниях (до и после бифуркации) и соответствующие временные реализации. Представленный далее анализ позволяет выделить отличительные особенности и общие черты суперкритической и субкритической бифуркаций Андронова–Хопфа, бифуркации инвариантной кривой седло-узла, гомоклинической бифуркации и бифуркации двукратного предельного цикла.

3.1. Бифуркация Андронова–Хопфа

Суперкритическая бифуркация Андронова–Хопфа. Суперкритическая бифуркация Андронова–Хопфа в предложенной модели проявляется при плавном изменении параметра b . Теоретически этот переход происходит при пересечении парой комплексно-сопряженных собственных значений мнимой оси; знак первого коэффициента Ляпунова определяет критичность: $l_1 < 0$ – суперкритическая, $l_1 > 0$ – субкритическая. Вблизи стационарной точки

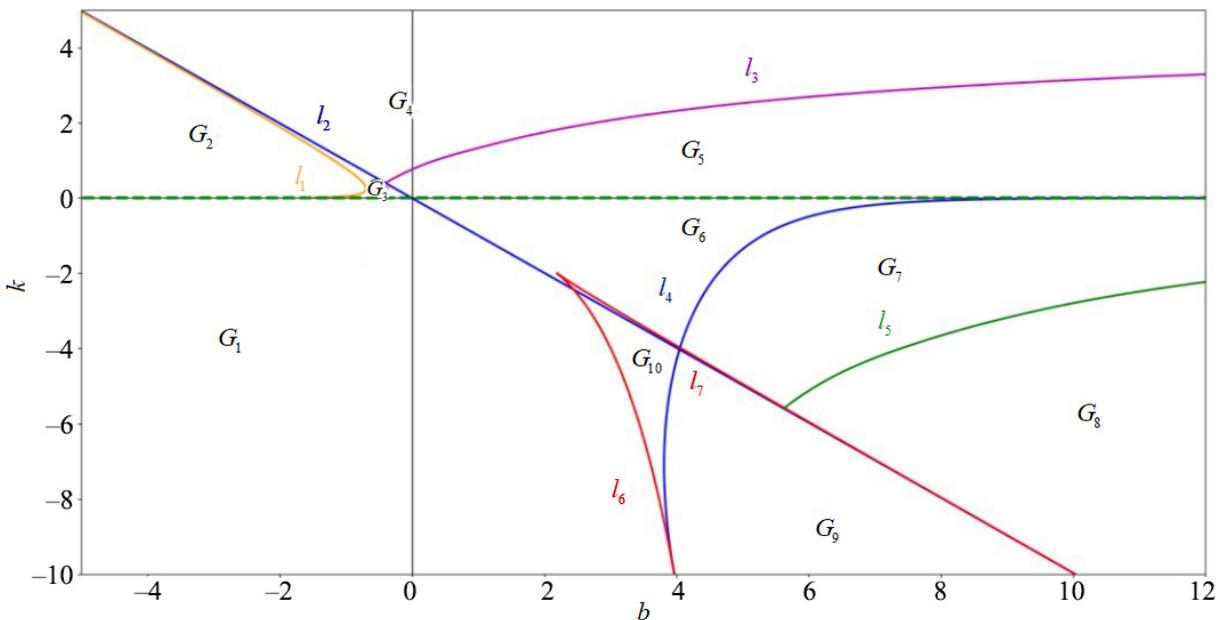


Рис. 2. Бифуркационная диаграмма на плоскости параметров (b, k) (цвет онлайн)

Fig. 2. Bifurcation diagram on the (b, k) parameter plane (color online)



Таблица 1 / Table 1

Типы областей G_i на бифуркационной диаграмме
Types of dynamics in different regions G_i

№ п/п / No.	Количество состояний равновесия (СР) / Number of equilibria	Тип СР / Type of equilibria	Предельный цикл (ПЦ) / Limit cycle (LC)
1	1	Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus	Нет / None
2	0	Нет / None	Нет / None
3	2	Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus Седло / Saddle	Нет / None
4	2	Неустойчивый узел/фокус / Unstable node/focus Седло / Saddle	Нет / None
5	2	Неустойчивый узел/фокус / Unstable node/focus Седло / Saddle	Устойчивый ПЦ / Stable LC
6	1	Неустойчивый узел/фокус / Unstable node/focus	Устойчивый ПЦ / Stable LC
7	1	Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus	Устойчивый и неустойчивый ПЦ / Stable and unstable LC
8	1	Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus	Нет / None
9	3	Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus Седло / Saddle	Неустойчивый ПЦ / Unstable LC
10	3	Неустойчивый узел/фокус / Unstable node/focus Устойчивый узел/фокус / Stable node/focus Седло / Saddle	Нет / None

Таблица 2 / Table 2

Классификация бифуркационных кривых l_i
Classification of bifurcation curves l_i

№ кривой / No. of curve	Тип бифуркации / Bifurcation type
l_1	Седло-узловая / Saddle-node
l_2	Суперкритическая бифуркация Андронова–Хопфа / Supercritical Andronov–Hopf bifurcation
l_3	Гомоклиническая / Homoclinic bifurcation
l_4	Субкритическая бифуркация Андронова–Хопфа / Subcritical Andronov–Hopf bifurcation
l_5	Бифуркация двукратного предельного цикла / Double limit-cycle bifurcation (fold of limit cycles)
l_6	Седло-узловая / Saddle-node
l_7	Бифуркация инвариантной кривой седло-узла / Saddle-node on invariant circle

малые амплитуды возникающего предельного цикла пропорциональны квадратному корню отклонения параметра от критического значения, что обеспечивает мягкий, непрерывный старт колебаний. Рассмотрим состояния равновесия предложенной системы (1).

Состояния равновесия имеют координаты:

$$\begin{cases} -x^* + k(2e^{-x^*} - e^{-2x^*}) + b = 0 \\ y^* = 2e^{-x^*} - e^{-2x^*} \end{cases} .$$

Якобиан системы:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu} (2e^{-x^*} - 2e^{-2x^*}) & \frac{1}{\mu} \\ -1 & k \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Обозначим:

$$a(x^*) = \frac{1}{\mu} (2e^{-x^*} - 2e^{-2x^*}).$$

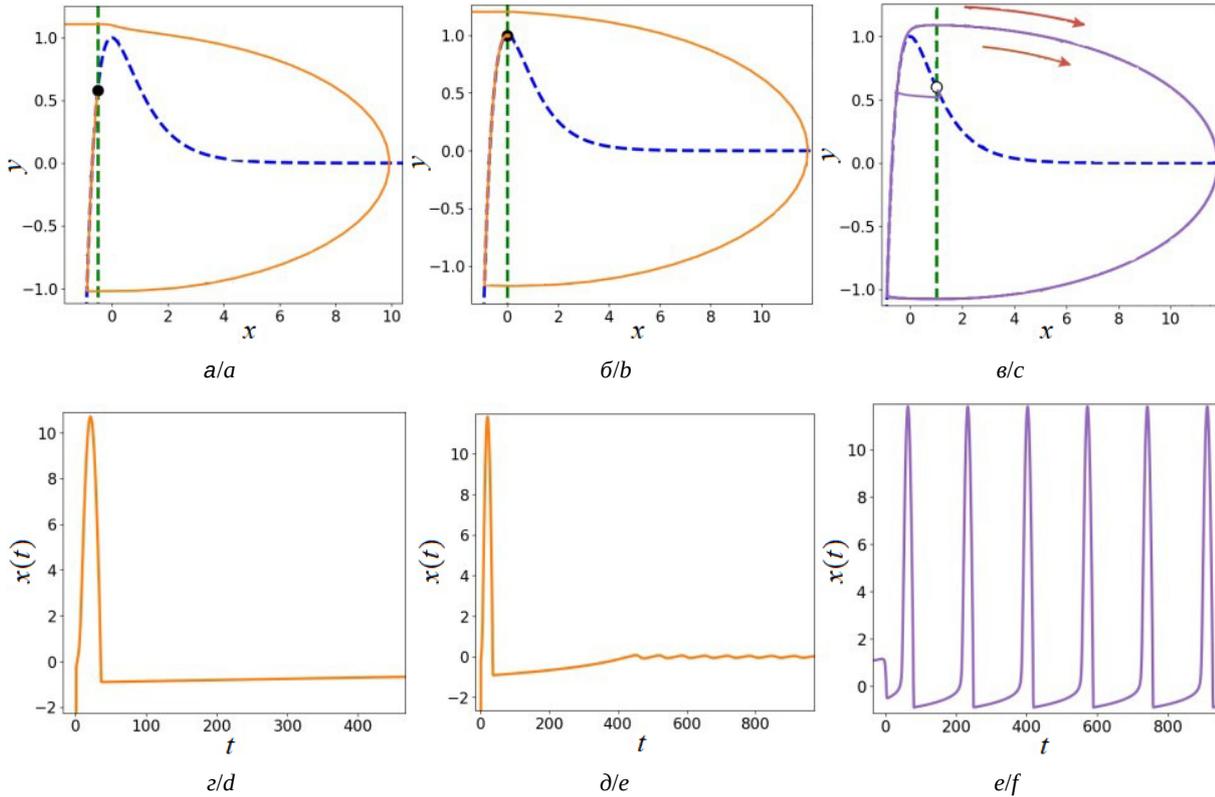


Рис. 3. Динамика нейрона при суперкритической бифуркации Андронова–Хопфа: а, з – фазовый портрет и временная реализация до бифуркации, аттрактор – устойчивый фокус; б, д – фазовый портрет и временная реализация в точке бифуркации; в, е – фазовый портрет и временная реализация после бифуркации, аттрактор – устойчивый предельный цикл (цвет онлайн)

Fig. 3. Dynamics of the neuron under a supercritical Andronov–Hopf bifurcation: a, d – phase portrait and time series before the bifurcation; attractor – stable focus; b, e – phase portrait and time series at the bifurcation point; c, f – phase portrait and time series after the bifurcation; attractor – stable limit cycle (color online)

Условия бифуркации Андронова–Хопфа:

$$\begin{aligned} \text{tr}(J) = a(x^*) + k = 0 &\Rightarrow k(x^*) = -a(x^*) = \\ &= -\frac{1}{\mu} (2e^{-x^*} - 2e^{-2x^*}). \end{aligned}$$

После несложных вычислений получим параметрически заданную кривую, соответствующую суперкритической бифуркации Андронова–Хопфа:

$$\begin{aligned} k(x^*) &= -\frac{1}{\mu} (2e^{-x^*} - 2e^{-2x^*}), \\ b(x^*) &= x^* + \frac{1}{\mu} (4e^{-2x^*} - 6e^{-3x^*} + 2e^{-4x^*}). \end{aligned}$$

Динамику нейрона при суперкритической бифуркации Андронова–Хопфа отражает рис. 3. До бифуркации (рис. 3, а, з; $b = -0.5, k = 0$, область G_1) все траектории сходятся к устойчивому фокусу, а в динамике $x(t)$ наблюдаются затухающие колебания.

В точке бифуркации (рис. 3, б, д; $b = 0, k = 0$; бифуркационная кривая l_2): фокус теряет устойчивость, начинает зарождаться малый цикл, что видно по слабым колебаниям и едва заметному замыканию траекторий.

После бифуркации (рис. 3, в, е; $b = 0.5, k = 0$; область G_6): устойчивый предельный цикл сформирован: траектории на фазовом портрете образуют замкнутую кривую, а $x(t)$ демонстрирует регулярные автоколебания постоянной амплитуды.

Важным свойством возникшего предельного цикла является широкая область параметрической устойчивости: небольшие изменения ключевых параметров не приводят к исчезновению колебаний, что обеспечивает надежность работы модели в присутствии разнообразных внешних возмущений. Это позволяет использовать предложенную систему в задачах моделирования спайковой активности нейронов в условиях изменяющейся среды, сохраняя основные динами-

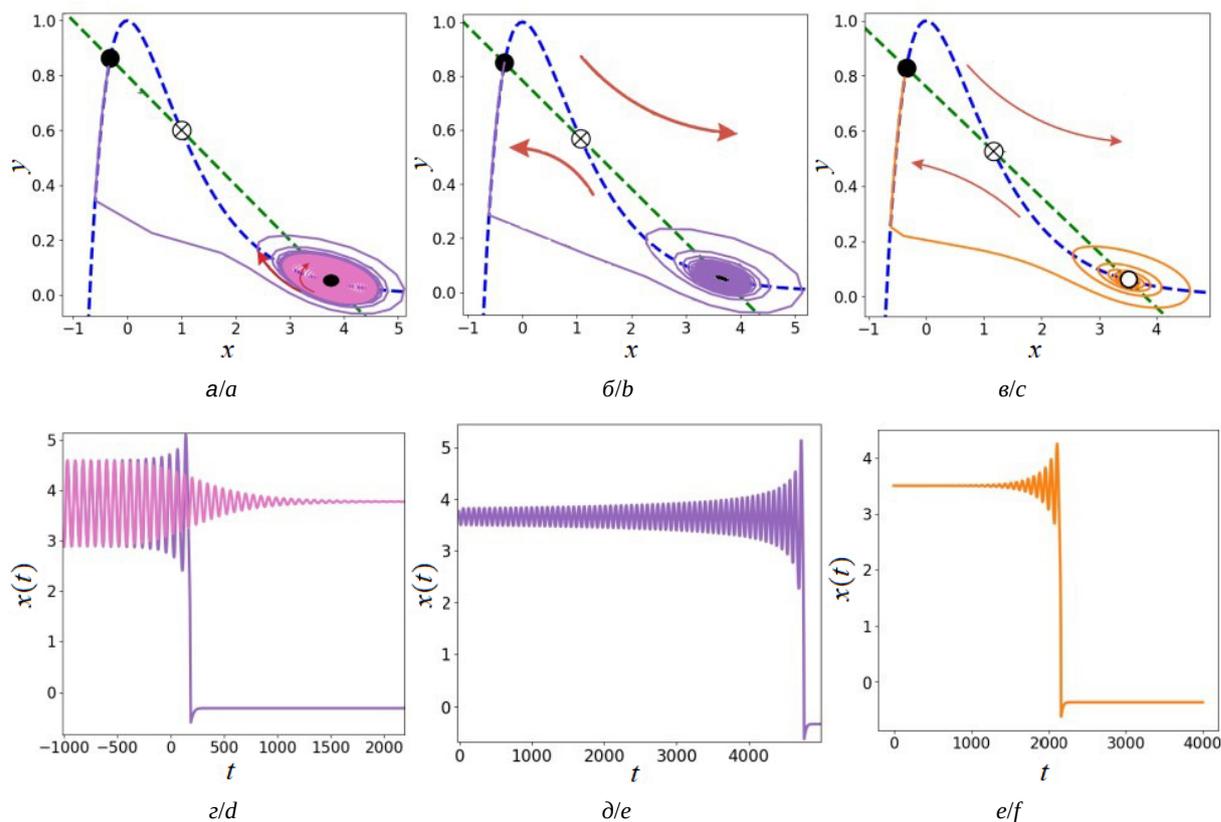


Рис. 4. Динамика нейрона при субкритической бифуркации Андронова–Хопфа: *a, z* – фазовый портрет и временная реализация до бифуркации; бистабильность (два устойчивых фокуса); *б, д* – фазовый портрет и временная реализация в точке бифуркации; *в, е* – фазовый портрет и временная реализация после бифуркации; аттрактор – устойчивый фокус (цвет онлайн)

Fig. 4. Dynamics of the neuron under a subcritical Andronov–Hopf bifurcation: *a, d* – phase portrait and time series before the bifurcation; bistability (two stable focus); *б, е* – phase portrait and time series at the bifurcation point; *с, f* – phase portrait and time series after the bifurcation; attractor – stable focus (color online)

ческие характеристики при вариациях входных сигналов.

Субкритическая бифуркация Андронова–Хопфа. В отличие от суперкритической, субкритическая бифуркация характеризуется тем, что неустойчивый предельный цикл возникает уже до потери устойчивости фокуса (рис. 4).

До бифуркации (рис. 4, *a, z*; $b = 4, k = -5$; область G_{10}): Существует два аттрактора: Для начальных условий внутри неустойчивого предельного цикла траектории затухающими колебаниями сходятся к фокусу. Для начальных условий снаружи этого цикла система уходит к удалённому устойчивому равновесию на левой ветви изоклины.

В точке бифуркации (рис. 4, *б, д*; $b = 3.916, k = -5$; бифуркационная кривая l_4): Радиус неустойчивого цикла стремится к нулю, и цикл сливается с фокусом. В состоянии равно-

весия наблюдается резкое увеличение времени релаксации и медленное спиральное удаление.

После бифуркации (рис. 4, *в, е*; $b = 3.8, k = -5$; область G_9): фокус теряет устойчивость и становится неустойчивым; малый предельный цикл исчез: все траектории покидают окрестность фокуса и направляются к удалённому устойчивому состоянию равновесия за пределами исчезнувшего цикла.

3.2. Гомоклиническая бифуркация

Еще один сценарий перехода от режима покоя к спайковой активности связан с гомоклинической бифуркацией: неустойчивая и устойчивая сепаратрисы седла сливаются, образуя гомоклиническую орбиту. На фазовых портретах сепаратрисы выделены красным пунктиром (рис. 5).

До бифуркации (рис. 5, *а, z*; $b = 0, k = 1$; область G_4): в фазовом пространстве присутствуют

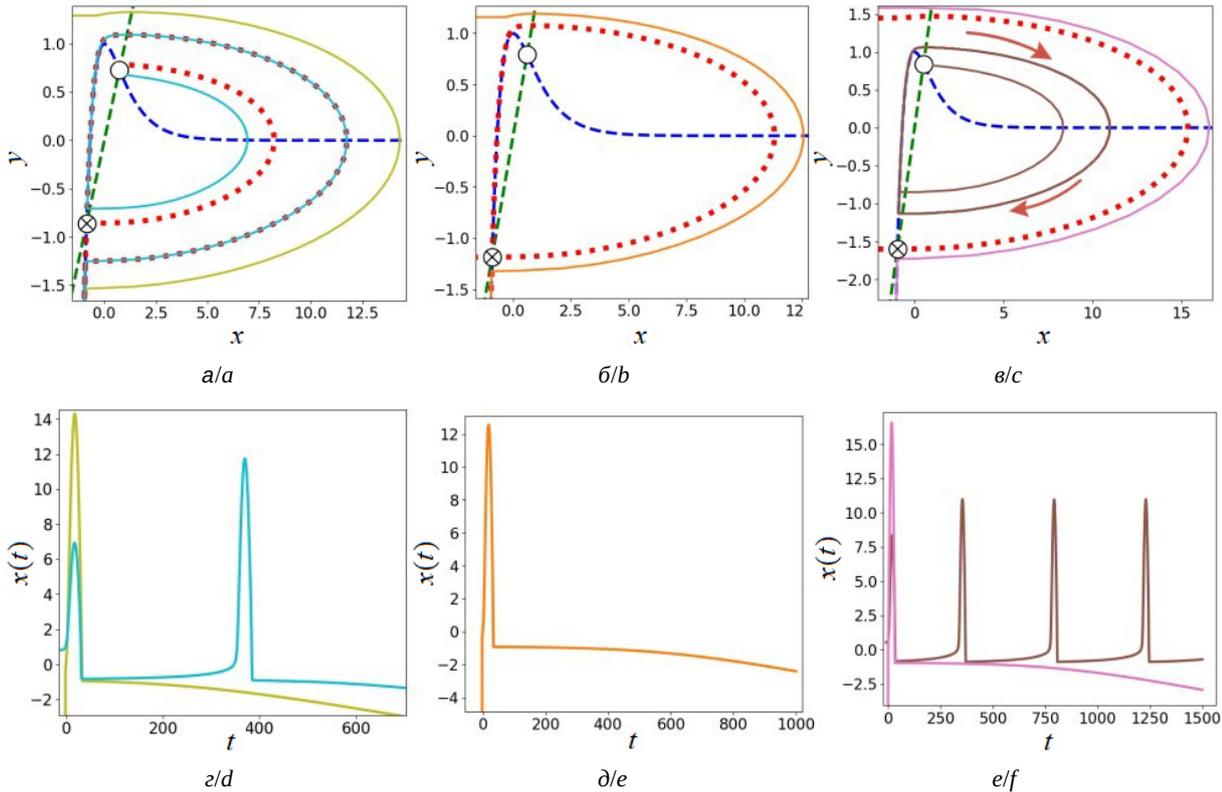


Рис. 5. Динамика нейрона при гомоклинической бифуркации: а, г – фазовый портрет и временная реализация до бифуркации, нет аттрактора; б, д – фазовый портрет и временная реализация в точке бифуркации, гомоклиническая орбита; в, е – фазовый портрет и временная реализация после бифуркации, аттрактор – устойчивый предельный цикл (цвет онлайн)

Fig. 5. Dynamics of the neuron under a homoclinic bifurcation: a, d – phase portrait and time series before the bifurcation; no attractor; b, e – phase portrait and time series at the bifurcation point; homoclinic orbit; c, f – phase portrait and time series after the bifurcation; attractor – stable limit cycle (color online)

седловая точка и неустойчивый фокус, при этом предельный цикл отсутствует. Все траектории уходят на изоклину медленных движений и при $t \rightarrow \infty$ стремятся к $y \rightarrow -\infty$.

В точке бифуркации (рис. 5, б, д; $b = 0$, $k = 0.766$; бифуркационная кривая l_3): неустойчивая и устойчивая ветви сепаратрисы седла соединяются, образуя гомоклиническую петлю. Период движения по орбите стремится к бесконечности.

После бифуркации (рис. 5, в, е; $b = 0$, $k = 0.6$; область G_5): появляется устойчивый предельный цикл. Траектории между сепаратрисами сходятся к этому циклу, тогда как траектории, начавшиеся вне бассейна притяжения предельного цикла, уходят на медленную ветвь и при $t \rightarrow \infty$ стремятся к $y \rightarrow -\infty$.

Седловая величина при $b = 0$ и $k = 0.766$ определяется как сумма собственных чисел якобиана:

$$\sigma = \lambda_s + \lambda_u = 7.334 + 0.006 = -7.328. \quad (3)$$

Здесь $\lambda_s < 0$ и $\lambda_u > 0$ – собственные значения якобиана в седловой точке по устойчивому и неустойчивому направлениям соответственно; $\sigma = \lambda_s + \lambda_u$ – седловая величина. При $\sigma < 0$ реализуется суперкритическая гомоклиническая бифуркация: разрушение гомоклинической петли порождает устойчивый предельный цикл большой амплитуды; при $\sigma > 0$ – наоборот, цикл неустойчив.

3.3. Бифуркация двукратного предельного цикла

Четвертый сценарий рождения спайковой активности имеет место через бифуркацию двукратного (или двойного) предельного цикла. При бифуркации двукратного предельного цикла в модели при изменении параметра b в окрестности критического значения b_f в фазовом пространстве возникает пара циклов – устойчивый и неустойчивый (рис. 6).

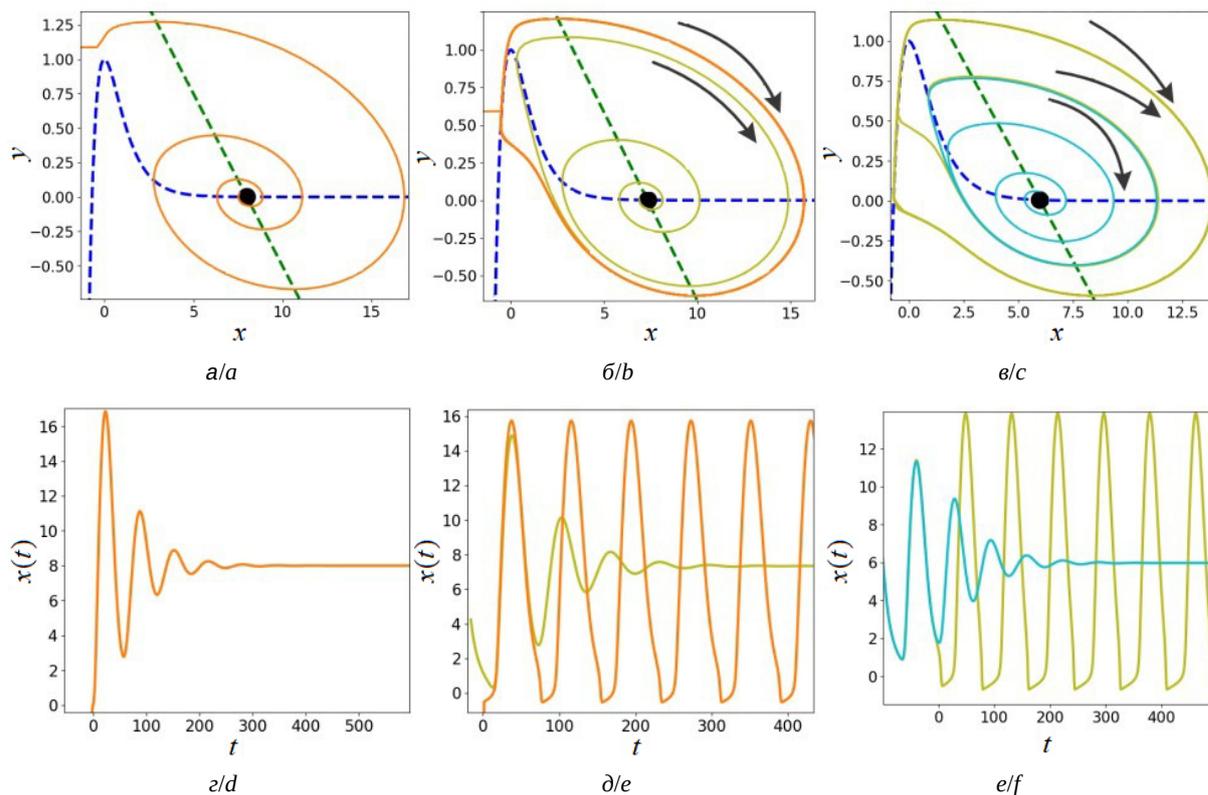


Рис. 6. Динамика нейрона при бифуркации двукратного предельного цикла: а, г – фазовый портрет и временная реализация до бифуркации, аттрактор – устойчивый фокус; б, д – фазовый портрет и временная реализация в точке бифуркации, двукратный предельный цикл; в, е – фазовый портрет и временная реализация после бифуркации, бистабильность: аттракторы – устойчивый предельный цикл и устойчивый фокус (цвет онлайн)

Fig. 6. Dynamics of the neuron under a fold of limit cycles bifurcation: a, d – phase portrait and time series before the bifurcation; attractor – stable focus; b, e – phase portrait and time series at the bifurcation point; double limit cycle; c, f – phase portrait and time series after the bifurcation; bistability: attractors – stable limit cycle and stable focus (color online)

До бифуркации (рис. 6, а, г; $b = 8, k = -4$; область G_8): существует только устойчивый фокус, к которому сходятся все траектории. Предельные циклы отсутствуют.

В точке бифуркации (рис. 6, б, д; $b = 7.336, k = -4$; бифуркационная кривая l_5): при изменении параметра устойчивый предельный цикл приближается к неустойчивому, они сливаются. В точке слияния периодическая полуустойчивая орбита: она устойчива для начальных условий со стороны, отвечающей устойчивому предельному циклу и неустойчива со стороны, отвечающей неустойчивому.

После бифуркации (рис. 6, в, е; $b = 6, k = -4$; область G_7): траектории, стартующие внутри неустойчивого цикла, направляются к фокусу, а стартующие снаружи – устремляются к внешнему устойчивому предельному циклу.

Важной особенностью данного сценария является бистабильность: для b чуть меньше бифуркационного значения нейрон остаётся

в покое, а для b чуть выше – переходит на устойчивый цикл. Это обеспечивает пороговое поведение и возможность резкого возбуждения при незначительном изменении внешнего воздействия.

3.4. Бифуркация инвариантной кривой седло-узла

Обнаружена бифуркация инвариантной кривой седло-узла, т. е. седло-узловая бифуркация с дополнительным условием: она возникает на инвариантной замкнутой кривой (рис. 7).

До бифуркации (рис. 7, а, г; $b = 3.005, k = -3.4$; область G_{10}): в фазовом пространстве сосуществуют седло и узел; неустойчивые ветви сепаратрис седла направляются к узлу; предельного цикла нет.

В точке бифуркации (рис. 7, б, д; $b = 3.005, k = -2.897$; бифуркационная кривая l_7): при подходе параметров к критическому значению седло и узел сливаются в точку типа седло-узел на инвариантной кривой. Траектории вырожда-

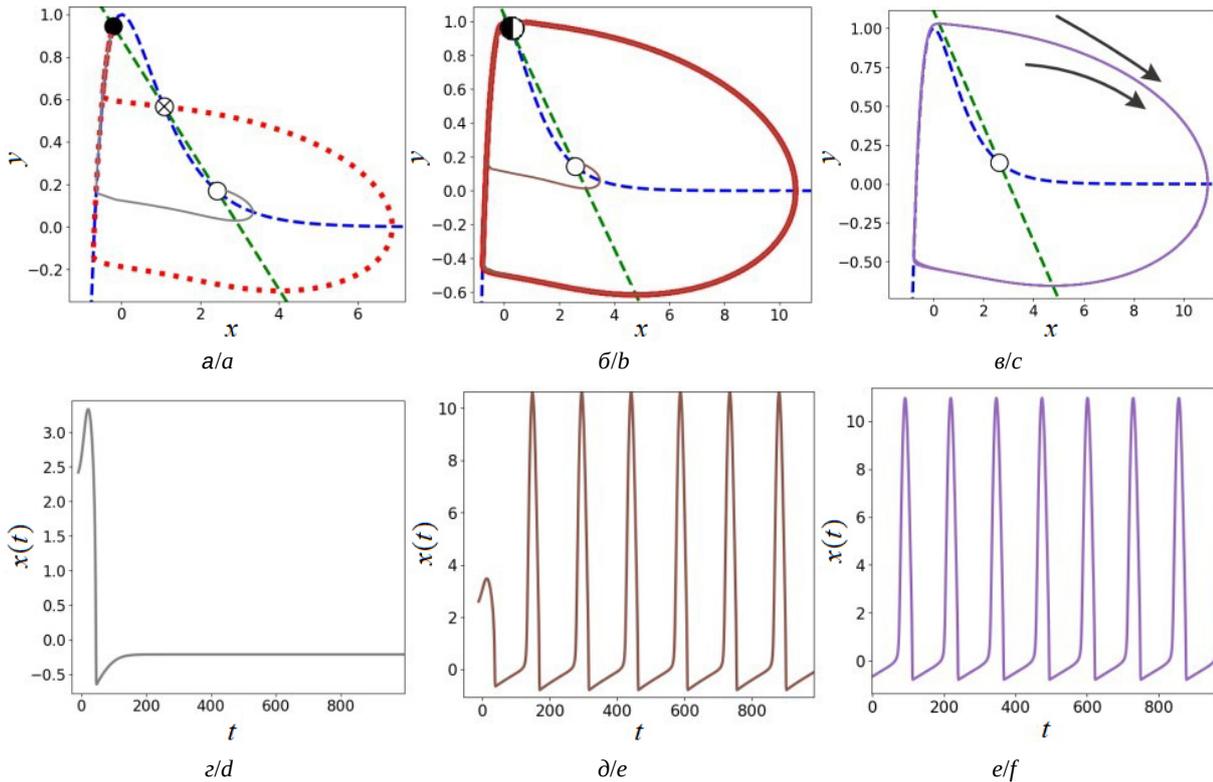


Рис. 7. Динамика нейрона при бифуркации инвариантной кривой седло-узла: *a, z* – фазовый портрет и временная реализация до бифуркации, аттрактор – устойчивый фокус; *б, д* – фазовый портрет и временная реализация в точке бифуркации, инвариантная замкнутая кривая; *в, e* – фазовый портрет и временная реализация после бифуркации, аттрактор – устойчивый предельный цикл (цвет онлайн)

Fig. 7. Dynamics of the neuron under a saddle-node on invariant circle (SNIC) bifurcation: *a, d* – phase portrait and time series before the bifurcation; attractor – stable focus; *b, e* – phase portrait and time series at the bifurcation point; saddle-node on invariant circle (SNIC); *c, f* – phase portrait and time series after the bifurcation; attractor – stable limit cycle (color online)

ются в замкнутую инвариантную окружность, проходящую через точку седло-узел.

После бифуркации (рис. 7, *в, e*; $b = 3.005$, $k = -2.7$; область G_6): возникает устойчивый предельный цикл; при удалении от критического значения система переходит в режим регулярной спайковой активности.

Заключение

В данной работе предложена двумерная математическая модель нейрона, специально разработанная для детального анализа ключевых сценариев перехода от состояния покоя к генерации периодических импульсов (спайковой активности). Модель обладает минимальной структурой с одной быстрой и одной медленной переменной, однако, несмотря на простоту, она демонстрирует богатство бифуркационных явлений.

Проведённый аналитический анализ позволил определить условия для бифуркации

Андропова–Хопфа: были найдены явные выражения параметрических зависимостей, задающих границы переходов от стационарных режимов к автоколебаниям. Аналитические выражения для параметров $b(x)$ и $k(x)$ было дополнены подробным численным моделированием, подтверждающим теоретические выводы и позволяющим наглядно продемонстрировать динамическое поведение системы в окрестности бифуркационных значений параметров.

Численное исследование модели позволило построить подробную бифуркационную диаграмму на плоскости параметров (b, k) , разделяющую различные режимы поведения нейрона. Были выявлены четыре основных сценария перехода к спайковой активности:

- суперкритическая бифуркация Андропова–Хопфа, характеризующаяся рождением из устойчивого фокуса устойчивого предельного цикла. Это соответствует мягкому возбуждению нейронной мембраны;



- гомоклиническая бифуркация, связанная с образованием гомоклинической орбиты седла и последующим рождением устойчивого предельного цикла большой амплитуды, характерной для систем с ярко выраженными возбуждающими свойствами;
- бифуркация двукратного предельного цикла, ведущая к одновременному возникновению устойчивого и неустойчивого циклов и сопровождающаяся явным гистерезисом и бистабильностью, важной для описания пороговых эффектов в нейронах;
- бифуркация инвариантной кривой седло-узла, описывающая возникновение устойчивого предельного цикла на месте исчезновения пары состояний равновесия (седла и узла), характеризующаяся постепенным увеличением периода колебаний при приближении к бифуркационной точке и переходом к медленным, но устойчивым автоколебаниям.

Кроме того, в модели также присутствует субкритическая бифуркация Андронова–Хопфа, при которой из неустойчивого фокуса рождается неустойчивый предельный цикл. Этот тип бифуркации не приводит к возникновению устойчивых автоколебаний, но сопровождается бистабильностью и скачкообразным переходом к колебаниям большой амплитуды.

Для каждого из перечисленных сценариев были построены детальные фазовые портреты и временные ряды, иллюстрирующие качественные изменения динамики нейрона. Это позволило наглядно продемонстрировать отличительные черты и динамическую специфику каждого типа бифуркации. Особенно значимым оказался выявленный широкий диапазон устойчивости режимов автоколебаний, который подтверждает практическую применимость модели в условиях реалистичных нейрофизиологических исследований, где внешние воздействия часто подвергаются случайным шумам.

Таким образом, предложенная двумерная модель нейрона не только расширяет класс доступных для анализа минималистичных моделей, но и обеспечивает высокую степень универсальности и наглядности при изучении основных механизмов генерации спайковой активности. Полученные результаты демонстрируют, что даже минималистичные модели способны точно воспроизводить широкий спектр

бифуркационных сценариев, характерных для биологических нейронных систем.

Перспективными направлениями дальнейшего развития данной работы могут стать следующие исследования:

- анализ влияния случайных воздействий и шума на устойчивость и динамические характеристики предельных циклов в рамках предложенной модели;
- построение сети из нескольких взаимодействующих нейронов, описанных данной моделью, и изучение коллективных режимов активности, таких как синхронизация и хаотическая динамика;
- исследование возможностей управления режимами нейронной активности с помощью внешних параметров и применения методов оптимального управления для стабилизации и переключения между различными динамическими состояниями нейрона.

Результаты работы имеют непосредственную фундаментальную значимость для исследований в области нейродинамики и могут быть полезны при моделировании нейрофизиологических процессов, связанных с восприятием, обучением и принятием решений, а также для конструирования нейроподобных вычислительных систем.

Список литературы

1. Dayan P., Abbott L. F. *Theoretical Neuroscience: Computational and Mathematical Modeling of Neural Systems*. Cambridge : MIT Press, 2001. 548 p.
2. Koch C. *Biophysics of Computation: Information Processing in Single Neurons*. New York : Oxford University Press, 1999. 562 p. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195104912.001.0001>
3. Дмитричев А. С., Касаткин Д. В., Клиньшов В. В., Кириллов С. Ю., Масленников О. В., Щапин Д. С., Некоркин В. И. Нелинейные динамические модели нейронов: обзор // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2018. Т. 26, № 4. С. 5–58. <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2018-26-4-5-58>
4. Ermentrout G. B., Terman D. H. *Mathematical Foundations of Neuroscience*. Springer : New York, NY, 2010. xiii+421 p. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-87708-2>
5. Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. Теория колебаний / перераб. и доп. Н. А. Железцова. 2-е изд. М. : Физматгиз, 1959. 915 с.
6. Арнольд В. И., Афраймович В. С., Ильяшенко Ю. С., Шильников Л. П. Теория бифуркаций. Теория катастроф // Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. Фундаментальные направления. М. : ВИНТИ, 1986. Т. 5. Динамические системы. С. 5–277.



7. Hodgkin A. L., Huxley A. F. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve // *J. Physiol.* 1952. Vol. 117, iss. 4. P. 500–544. <https://doi.org/10.1113/jphysiol.1952.sp004764>
8. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane // *Biophys. J.* 1961. Vol. 1, iss. 6. P. 445–466. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(61\)86902-6](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(61)86902-6)
9. Morris C., Lecar H. Voltage oscillations in the barnacle giant muscle fiber // *Biophys. J.* 1981. Vol. 35, iss. 1. P. 193–213. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(81\)84782-0](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(81)84782-0)
10. Izhikevich E. M. Simple model of spiking neurons // *IEEE Trans. Neural Netw.* 2003. Vol. 14, iss. 6. P. 1569–1572. <https://doi.org/10.1109/TNN.2003.820440>
- 2018, vol. 26, no. 4, pp. 5–58 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2018-26-4-5-58>
4. Ermentrout G. B., Terman D. H. *Mathematical Foundations of Neuroscience*. New York, Springer, 2010. xiii+421 p. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-87708-2>
5. Andronov A. A., Vitt A. A., Khaikin S. E. *Theory of Oscillators*. Oxford, Pergamon Press, 1966. xxxii+808 p.
6. Arnold V. I., Afrajmovich V. S., Il'yashenko Yu. S., Shil'nikov L. P. *Bifurcation Theory and Catastrophe Theory. Springer Series "Encyclopaedia of Mathematical Sciences"*, vol. 5. *Dynamical Systems V*. Berlin, Springer, 1994. ix+274 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-57884-7>
7. Hodgkin A. L., Huxley A. F. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *J. Physiol.*, 1952, vol. 117, iss. 4, pp. 500–544. <https://doi.org/10.1113/jphysiol.1952.sp004764>
8. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophys. J.*, 1961, vol. 1, pp. 445–466. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(61\)86902-6](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(61)86902-6)
9. Morris C., Lecar H. Voltage oscillations in the barnacle giant muscle fiber. *Biophys. J.*, 1981, vol. 35, iss. 1, pp. 193–213. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(81\)84782-0](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(81)84782-0)
10. Izhikevich E. M. Simple model of spiking neurons. *IEEE Trans. Neural Netw.* 2003, vol. 14, iss. 6, pp. 1569–1572. <https://doi.org/10.1109/TNN.2003.820440>

References

Поступила в редакцию 21.10.2025; одобрена после рецензирования 07.11.2025; принята к публикации 21.11.2025; опубликована 31.03.2026
The article was submitted 21.10.2025; approved after reviewing 07.11.2025; accepted for publication 21.11.2025; published 31.03.2026



ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 31–44
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1. P. 31–44
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-31-44>, EDN: EIZAWY

Научная статья
УДК 535.326:535.361.22:535.326:620.186.5

Анализ структурных изменений СВЧ- и УЗ-модифицированных углепластовых композитов методом низкокогерентной рефлектометрии

М. В. Алонова¹, И. В. Злобина^{1✉}, Н. В. Бекренев¹, Д. А. Зимняков^{1,2}

¹Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю. А., Россия, 410054, г. Саратов, ул. Политехническая, д. 77

²Институт проблем точной механики и управления РАН, Россия, 410028, г. Саратов, ул. Рабочая, д. 24

Алонова Марина Васильевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Физика», alonova_marina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7772-3985>, AuthorID: 667431

Злобина Ирина Владимировна, кандидат технических наук, доцент кафедры «Техническая механика и мехатроника», irinka_7@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2331-7444>, AuthorID: 686083

Бекренев Николай Валерьевич, доктор технических наук, профессор кафедры «Техническая механика и мехатроника», nikolaj.bekrenev@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7457-1020>, AuthorID: 271817

Зимняков Дмитрий Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, ¹заведующий кафедрой «Физика», ²главный научный сотрудник лаборатории проблем лазерной диагностики технических и живых систем, zimnykov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9787-7903>, AuthorID: 29094

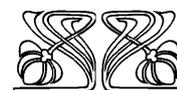
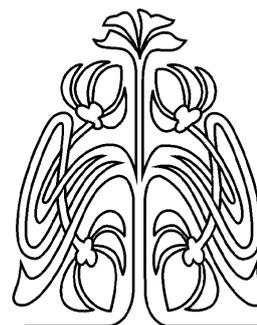
Аннотация. Метод низкокогерентной рефлектометрии применён к анализу структуры углепластовых композитных материалов в исходном состоянии и после СВЧ или ультразвукового воздействия. В качестве инструментальной основы для рефлектометрических измерений использован оптический когерентный томограф OCS 1300 SS в режиме В-сканирования. Анализ ОКТ-изображений образцов углепластовых композитов в исходном и модифицированном состоянии показал, что ультразвуковая модификация приводит к уменьшению коэффициента обратного рассеяния зондирующего пучка в зонах контакта углеродных волокон и полимерного наполнителя. При этом максимальный эффект достигается в случае применения в качестве модифицирующего фактора ультразвукового излучения с частотой 44 кГц и плотностью мощности 10 Вт/см². В работе обсуждаются возможные физические механизмы уменьшения коэффициента обратного рассеяния, обусловленные увеличением степени однородности структуры полимерной составляющей на супрамолекулярном уровне, и критерии обнаружения неоднородностей в зонах контакта «полимер–волокно».

Ключевые слова: низкокогерентная рефлектометрия, полимерные композиционные материалы, углеродные волокна, полиэфирэфиркетон

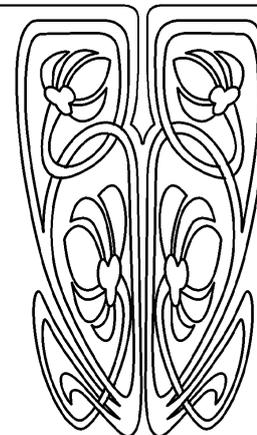
Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-00039, <https://rscf.ru/project/23-79-00039/>).

Для цитирования: Алонова М. В., Злобина И. В., Бекренев Н. В., Зимняков Д. А. Анализ структурных изменений СВЧ- и УЗ-модифицированных углепластовых композитов методом низкокогерентной рефлектометрии // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 31–44. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-31-44>, EDN: EIZAWY

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



**НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ**





Article

Analysis of structural changes in microwave- and ultrasound-modified carbon-fiber-reinforced polymer composites by low-coherence reflectometry

M. V. Alonova¹, I. V. Zlobina¹✉, N. V. Bekrenev¹, D. A. Zimnyakov^{1,2}

¹ Yuri Gagarin State Technical University of Saratov, 77 Politekhnikeskaya St., Saratov 410054, Russia

² Institute of Precision Mechanics and Control of the Russian Academy of Sciences, 24 Rabochaya St., Saratov 410028, Russia

Marina V. Alonova, alonova_marina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7772-3985>, AuthorID: 667431

Irina I. V. Zlobina, irinka_7_@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2331-7444>, AuthorID: 686083

Nikolay V. Bekrenev, nikolaj.bekrenev@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7457-1020>, AuthorID: 271817

Dmitriy A. Zimnyakov, zimnykov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9787-7903>, AuthorID: 29094

Abstract. Background and Objectives: Low-coherence reflectometry has traditionally been used to study the microstructure of biological tissues. Currently, the scope of its application is expanding, and the method is increasingly being employed to assess the characteristics of layered structures. The paper discusses possible physical mechanisms underlying the decrease in the scattering coefficient in the near-infrared region, attributed to an increased structural homogeneity of the polymer component at the supramolecular level. **Materials and Methods:** The low-coherence reflectometry method was applied to analyze the structure of carbon-fiber-reinforced polymer composite materials in their initial state and after microwave or ultrasonic treatment. An OSC 1300 SS optical coherence tomograph operating in B-scan mode was used as the instrumental platform for reflectometric measurements. **Results:** Analysis of the statistical and correlation characteristics of B-scan images of the surface layer of both pristine and modified composites has revealed that the modification leads to a reduction in the scattering coefficient of the probing radiation (wavelength 1300 nm) within the polymer matrix of the composite. The maximum effect is achieved when ultrasonic radiation with a frequency of 44 kHz and a power density of 10 W/cm² is used as the modifying agent. **Conclusion:** Further development of this research direction could facilitate the use of optical coherence tomography as a rapid, non-destructive method for quality control of the binder-filler interface in the surface layers of polymer composites.

Keywords: low-coherence reflectometry, polymer composite materials, carbon fibers, polyetheretherketone

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-79-00039, <https://rscf.ru/project/23-79-00039/>).

For citation: Alonova M. V., Zlobina I. V., Bekrenev N. V., Zimnyakov D. A. Analysis of structural changes in microwave- and ultrasound-modified carbon-fiber-reinforced polymer composites by low-coherence reflectometry. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 31–44 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-31-44>, EDN: EIZAWY

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

Введение

На протяжении последних десятилетий неуклонно отмечается рост использования полимерных композиционных материалов (ПКМ) во всех ключевых отраслях экономики [1]. Наибольший стоимостной вес в общем объеме рынка имеют стекло- и углеволокна, используемые в качестве наполнителей для ПКМ [2, 3]. Кроме того, можно отметить возрастание доли композитов, сформированных на основе термопластичных матриц [4]. Преимущественно в их состав вводят в качестве армирующего компонента короткие волокна, что позволяет получать объекты с экономией времени до 80% по сравнению с изделиями, получаемыми из композитов на основе реактопластов и непрерывных волокон [5]. В настоящее время получили развитие технологии, благодаря которым становится возможным формирование полимерных композитов на основе термопластов с армированием непрерывными волокнами, что открывает дополнительные возможности по быстрому изготовлению объектов различного

назначения с заданным распределением армирующих компонентов [6]. Одним из недостатков их использования является достаточно высокая дефектность объектов, что обусловлено не всегда достаточным разогревом термопласта в процессе изготовления [7–9]. Для снижения дефектности существует ряд методов, наиболее перспективными из которых являются электрофизические методы (в частности, ультразвуковое и СВЧ-воздействие) [10–13], что обусловлено их упрочняющим влиянием на готовые объекты [13].

В связи с тем, что ПКМ в числе прочих отраслей используются в самолето-, ракетостроении, судостроении [14], особое внимание необходимо уделять обеспечению надежной и безопасной эксплуатации ответственных конструкций из них [15]. Для этого необходимо применение методов неразрушающего контроля [16], среди которых можно выделить оптические [17–19], электрические [20, 21], акустические [19, 22, 23], магнитные [24, 25], тепловые [26–28], микрорадиоволновые [29].



Каждый из этих методов имеет определенные ограничения по чувствительности, сложности аппаратного оформления и условиям проведения измерений [30].

В данной работе рассмотрен метод низкокогерентной рефлектометрии для выявления дефектов в объеме полимера и пограничных зонах между волокнами и полимерным наполнителем в композитах на основе термопласта и непрерывного углеродного волокна.

Важной составляющей реализации методов низкокогерентной рефлектометрии является использование современного программного обеспечения, предназначенного для управления системой регистрации и визуализации изучаемых областей с обеспечением необходимого разрешения, с минимальным количеством артефактов и значительным снижением искажений [31].

В [32–34] авторами была продемонстрирована эффективность этого метода при мониторинге диффузии химических агентов в dentine зуба человека. В [5] авторы показали возможность применения низкокогерентной рефлектометрии применительно к исследованию проникновения наночастиц диоксида титана в эмаль и дентин зубов человека *in vitro*. Были получены ОКТ-изображения среза зуба до и после обработки наночастицами диоксида титана. Для их количественной оценки были построены усредненные А-сканы, полученные в различные моменты времени в процессе обработки образца наночастицами диоксида титана.

Результаты ОКТ-сканирования и обработки полученных изображений позволили оценить заметное увеличение сигнала ОКТ с глубин, достигающих 300–600 мкм [35].

Авторами работы [36] оптическая когерентная томография (ОКТ) была применена для бесконтактной характеристики фантомов – тест-объектов, имитирующих оптические свойства биологических объектов [36–43]. В работе [36] фантомы изготавливались из поливинилхлорид-пластизола и силикона и использовались для моделирования оптических свойств кожи и капилляров.

Анализ литературы показал, что основное число работ по диагностическому использованию ОКТ выполнено применительно к ограниченной группе объектов преимущественно для решения диагностических задач в биологии и медицине [44–46].

Метод низкокогерентной рефлектометрии может быть применен для исследования состава

и структуры ряда объектов, которые характеризуются наличием слоев или отдельных включений, имеющих различные показатели преломления. Отметим, что объектами исследования могут служить не только биологические системы, но и системы искусственного происхождения, в частности наполненные полимеры.

1. Материалы

В исследованиях использованы образцы монослоя композита, сформированного на 3D принтере Anisoprint Composer A4 из препрега, армированного жгутом из непрерывных углеродных волокон, пропитанного эпоксидной смолой марки ЭД-20 и покрытого полиэфирэфиркетонном (ПЭЭК). Поверхность образцов, которую использовали непосредственно для исследования, представляла собой слой ПЭЭК. Ниже него располагался тонкий слой реактопластичного полимера (эпоксидная смола марки ЭД-20), в средней части располагались углеродные волокна (рис. 1).

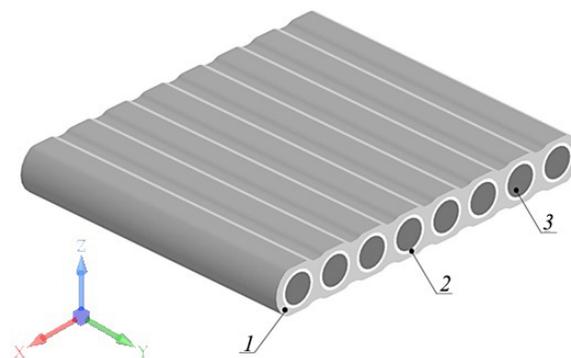


Рис. 1. Монослой полимерного композиционного материала: 1 – термопласт (ПЭЭК), 2 – реактопласт (эпоксидная смола марки ЭД-20), 3 – углеродное волокно

Fig. 1. Monolayer of polymer composite material: 1 – thermoplastic (PEEK), 2 – thermosetting plastic (ED-20 epoxy resin), 3 – carbon fiber

Были изготовлены 5 групп образцов размерами 30×10×1.2 мм: контрольные и модифицированные с применением СВЧ и ультразвуковой (УЗ) обработки. Ультразвуковую обработку образцов осуществляли на экспериментальной ультразвуковой установке с многочастотным ультразвуковым генератором, обеспечивающим частотный диапазон 20–60 кГц с дискретностью регулировки 10 Гц, что позволяет осуществлять точную настройку системы в резонанс.

В процессе обработки образец закрепляли на специальном перемещающемся столе



со встроенной пружиной нагружения. Инструмент-концентратор диаметром 14 мм, обеспечивающий перекрытие всего поперечного размера образца, подводили до касания с образцом, плавно увеличивали нагрузку до 25 Н и выдерживали в течение 15 с. Далее нагрузку снимали, а образец перемещали на расстояние 10 мм в продольном направлении так, чтобы обеспечивалось перекрытие зон воздействия не более 5 мм. Операцию повторяли до обработки всей поверхности образца. Амплитуда колебаний инструмента составляла 10–12 мкм при резонансной частоте 24.5 кГц.

Обработку образцов в СВЧ электромагнитном поле осуществляли на экспериментальных СВЧ технологических установках при частоте излучения 2450 МГц в течение 2 мин и при частоте 915 МГц в течение 10 мин. Как показали ранее проведенные исследования [47], при данных режимах обеспечивается наибольшая эффективность модификации ПКМ, армированных углеродным волокном или тканями на его основе.

Обработку образцов в СВЧ электромагнитном поле осуществляли на лабораторных СВЧ технологических установках производства НПП «АгроЭкоТех» (г. Обнинск, Калужской обл.) и НПП «Исток» (г. Фрязино, Московской обл.).

Подробное описание структуры используемого композитного материала и методов его модификации приведено в [47–50].

2. Методы

Для инструментальной реализации метода низкокогерентной рефлектометрии был использован оптический когерентный томограф OCS 1300 SS (ThorLabs, США) с длиной волны зондирующего излучения 1300 нм, максимальной глубиной зондирования 3 мм, длиной трека сканирования 5 мм в поперечном направлении. Размер получаемых в режиме *B*-сканирования составлял 512 на 720 пикселей.

Образцы помещались на предметный столик так, что углеродные волокна располагались параллельно оси *Y* (см. рис. 1); сканирование по глубине происходило вдоль оси *Z* через слой полимера к волокнам, а поперечное сканирование осуществлялось вдоль оси *X* – перпендикулярно волокнам. Сканирование образца по глубине при фиксированном *x* формирует *A*-скан, а совокупность *A*-сканов, последовательно полученных вдоль трассы поперечного сканирования, является *B*-сканом. В качестве примера на рис. 2, а представлен *B*-скан для одного из контрольных образцов; зеленой линией отмечен выбранный для анализа *A*-скан. Соответственно, на рис. 2, б приведена зависимость амплитуды регистрируемого ОКТ-сигнала (в относительных единицах) от глубины зондирования для выбранного *A*-скана.

Отметим, что значение ОКТ-сигнала для глубины зондирования *z* определяется локальным

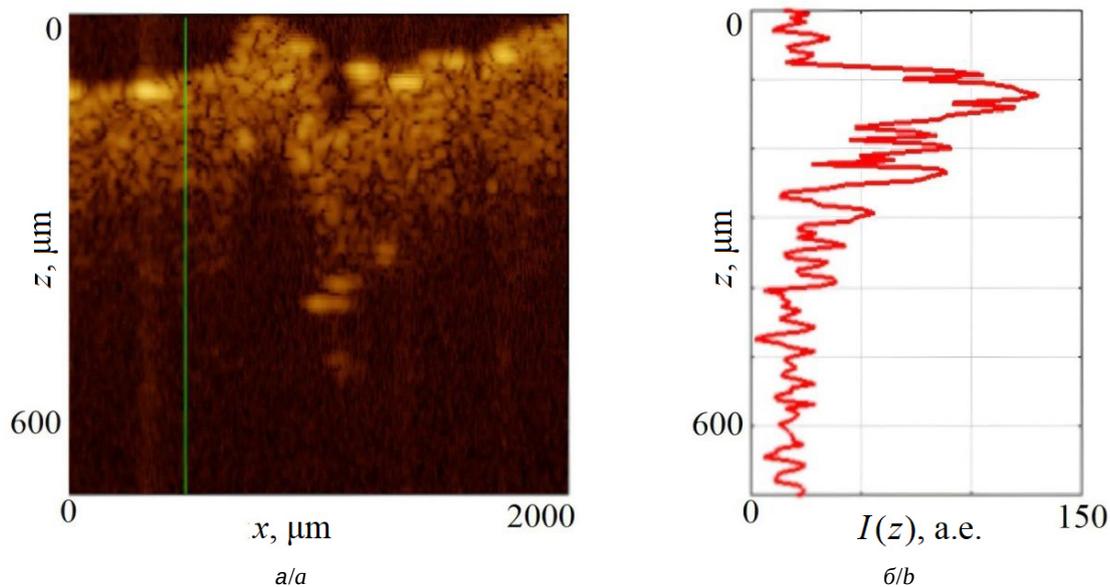


Рис. 2. Фрагмент *B*-скана исследуемого композита (а); амплитуда ОКТ-сигнала в зависимости от глубины зондирования для *A*-скана, выделенного зеленым на левой панели (б) (цвет онлайн)

Fig. 2. Fragment of a *B*-scan of the polymer under study (a); the *A*-scan value, along the line highlighted in green (b) (color online)



значением коэффициента отражения нерассеянной составляющей зондирующего пучка на заданной глубине. В то же время в регистрируемом ОКТ-сигнале присутствует значительная доля диффузно отраженного назад зондирующего излучения с выраженным флуктуационным характером (спекл-модуляцией). Таким образом, наличие в структуре выраженных границ раздела структурных составляющих с существенно различающимися значениями показателя преломления приводит к высокоамплитудным всплескам ОКТ-сигнала для значений глубины зондирования, соответствующих положениям границ раздела в образце. Флуктуационная составляющая ОКТ-сигнала характеризует вклад обратного рассеяния, связанного со случайными флуктуациями показателя преломления в зондируемом объеме. Выделение тренда зависимости амплитуды ОКТ-сигнала от глубины зондирования позволяет определить коэффициент затухания сигнала, обусловленного рассеянием зондирующего пучка в образце.

В ходе экспериментов исследовались наборы из 5 образцов, соответствующих контрольной группе и группам, подвергаемым СВЧ и УЗ модификации. Для каждого образца записывалось по 7 В-сканов с шагом смещения в поперечном направлении, равным 3 мм, в центральной области образцов. Из каждого В-скана выбиралось по 50 А-сканов, подвергаемых дальнейшему анализу, методика которого описана ниже.

По полученным наборам А- и В-сканов определялись следующие характеристики:

- 1) усредненный по глубине зондирования коэффициент затухания ОКТ-сигнала k , определяемый по выделенному из ОКТ-сигнала затухающему экспоненциальному тренду;
- 2) среднеквадратичное значение σ флуктуационной составляющей ОКТ-сигнала ($F(z)$), получаемой в результате вычитания выделенной трендовой составляющей из ОКТ-сигнала;
- 3) L^* – суммарная протяженность участков В-сканов, на которых наблюдается резкий скачок регистрируемого ОКТ-сигнала.

Нормированная флуктуационная составляющая

$$F(z) = I(z)/I_0 - \exp(-kz)$$

характеризует локальные отклонения интенсивности регистрируемого ОКТ-сигнала от экспоненциального тренда и обусловленную многократным рассеянием спекл-модуляцию сигнала.

3. Результаты и их обсуждение

Анализ полученных В-сканов показывает различия в ОКТ сигналах, получаемых на образцах контрольной группы и СВЧ- и УЗ-модифицированных образцах. На рис. 3–7 представлены типичные зависимости амплитуды ОКТ-сигналов от глубины зондирования для участков образцов, на которых присутствует только полимерный наполнитель и отсутствуют углеродные волокна.

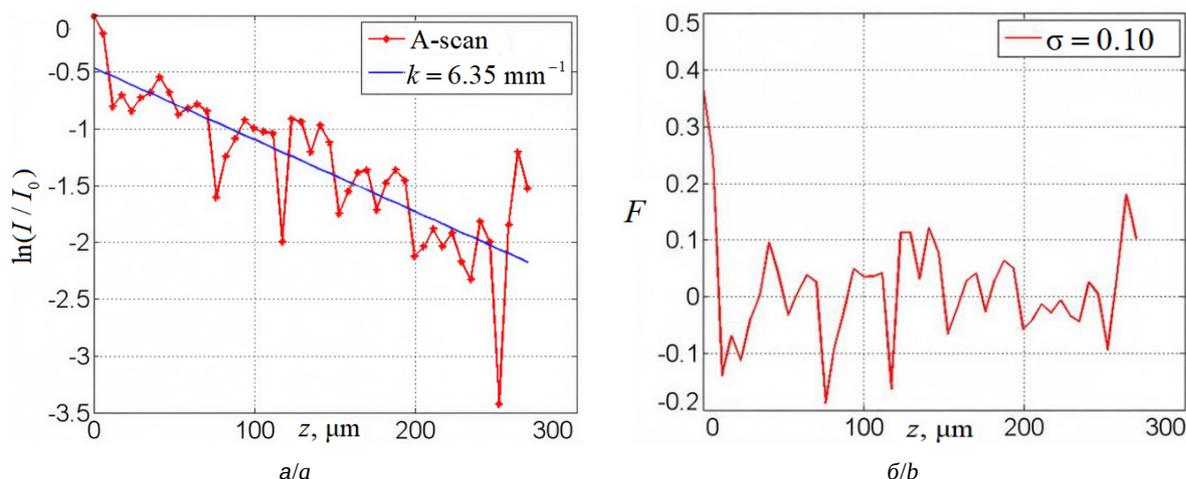


Рис. 3. Данные для контрольного образца композитного материала: ОКТ-сигнал и экспоненциальная аппроксимация с коэффициентом затухания $k = 6.35 \text{ мм}^{-1}$ (а); флуктуационная составляющая ОКТ-сигнала, характеризующаяся среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0.10$ (б) (цвет онлайн)

Fig. 3. Data for the control sample of the composite material: OCT response and exponential approximation with an attenuation coefficient $k = 6.35 \text{ mm}^{-1}$ (a); A-scan fluctuation relative to the exponential trend with a standard deviation $\sigma = 0.10$ (color online)

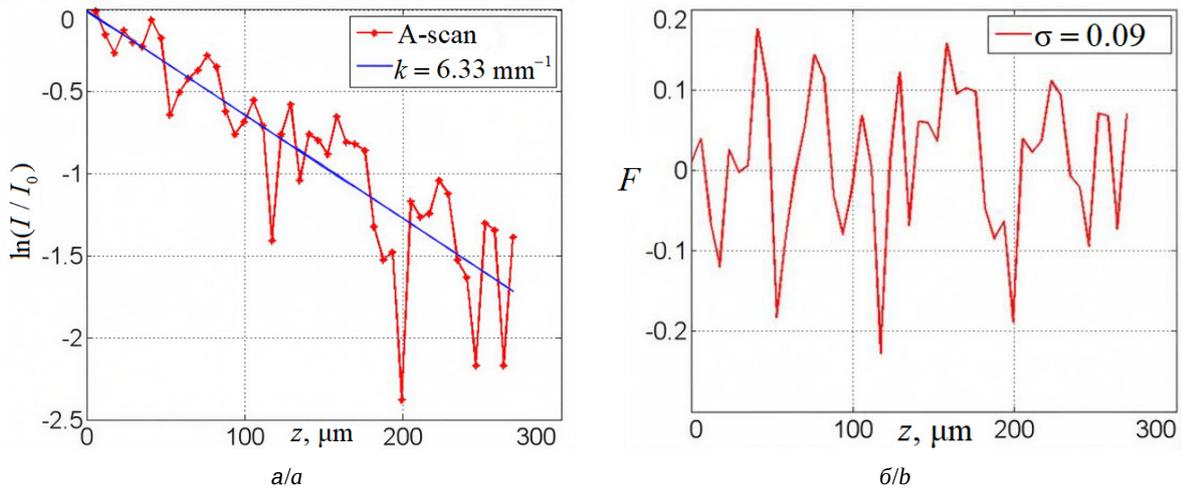


Рис. 4. Данные для образца, модифицированного воздействием СВЧ-излучения частотой 915 МГц: ОКТ-отклик и экспоненциальная аппроксимация с коэффициентом затухания $k = 6.33 \text{ мм}^{-1}$ (а); флуктуация А-скана относительно экспоненциального тренда со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0.09$ (б) (цвет онлайн)

Fig. 4. Data for a sample modified by exposure to 915 MHz microwave radiation: OCT response and exponential approximation with an attenuation coefficient $k = 6.33 \text{ mm}^{-1}$ (a); A-scan fluctuation relative to the exponential trend with a standard deviation $\sigma = 0.09$ (b) (color online)

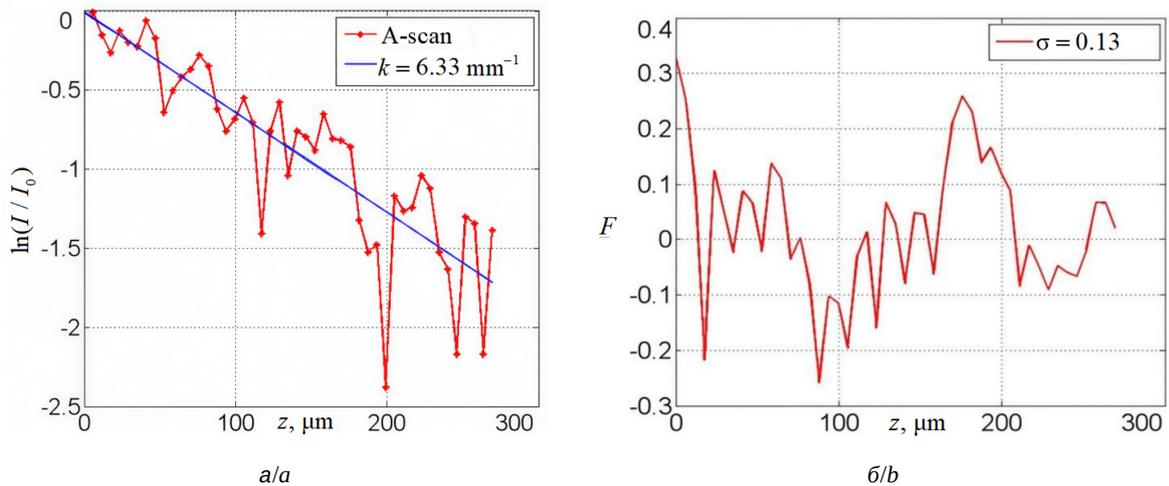


Рис. 5. Данные для образца, модифицированного под воздействием СВЧ-излучения частотой 2450 МГц: ОКТ-отклик и экспоненциальная аппроксимация с коэффициентом затухания $k = 6.33 \text{ мм}^{-1}$ (а); флуктуация А-скана относительно экспоненциального тренда со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0.13$ (б) (цвет онлайн)

Fig. 5. Data for a sample modified by exposure to microwave radiation with a frequency of 2450 MHz: OCT response and exponential approximation with an attenuation coefficient $k = 6.33 \text{ mm}^{-1}$ (a); A-scan fluctuation relative to the exponential trend with a standard deviation $\sigma = 0.13$ (b) (color online)

На рис. 3, а – 7, а также присутствуют аппроксимирующие трендовые линии $I(z) = I_0 \exp(-kz)$, где I_0 – подгоночный коэффициент (синие линии). На рис. 3, б – 7, б представлены флуктуационные составляющие полученных ОКТ-сигналов с соответствующими значениями σ .

Для анализа морфологических изменений, происходящих в полимерной составляющей композитного материала, использовался получаемый в результате выделения экспоненциального трен-

да коэффициент затухания k . Анализ полученных В-сканов поверхностного слоя исходной и модифицированной составляющей композитов показал, что модификация приводит к незначительному снижению коэффициента затухания зондирующего излучения k на длине волны 1300 нм в полимерной составляющей (рис. 8).

В результате обработки композиционного материала различными модифицирующими воздействиями незначительно изменяются оптические

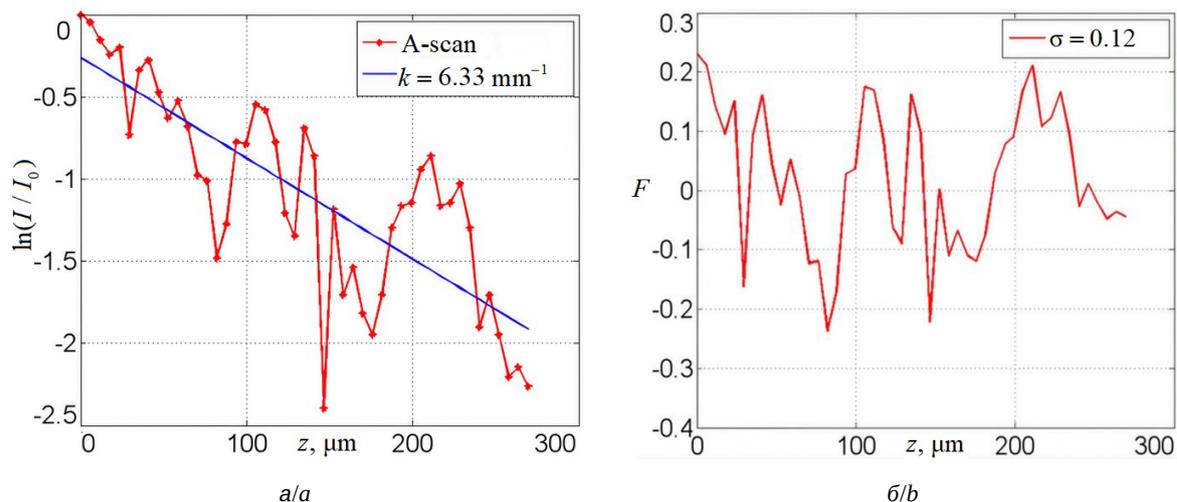


Рис. 6. Данные для образца, модифицированного под воздействием ультразвукового излучения частотой 22 кГц: ОКТ-отклик и экспоненциальная аппроксимация с коэффициентом затухания $k = 6.13 \text{ мм}^{-1}$ (а); флуктуация А-скана относительно экспоненциального тренда со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0.12$ (б) (цвет онлайн)

Fig. 6. Data for a sample modified by ultrasonic radiation with a frequency of 22 kHz: OCT response and exponential approximation with an attenuation coefficient $k = 6.13 \text{ mm}^{-1}$ (a); A-scan fluctuation relative to the exponential trend with a standard deviation $\sigma = 0.12$ (b) (color online)

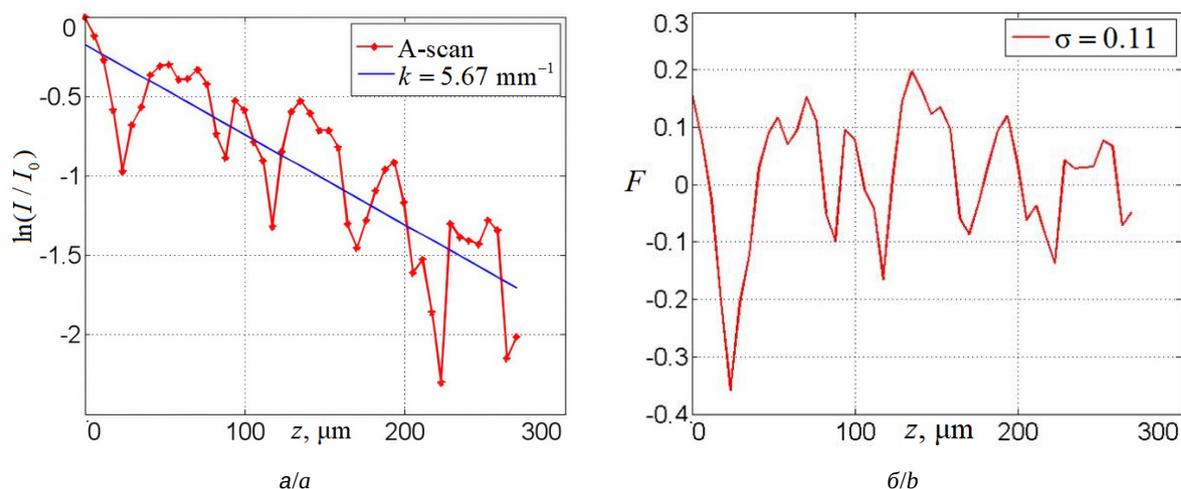


Рис. 7. Данные для образца, модифицированного под воздействием ультразвукового излучения частотой 44 кГц: ОКТ-отклик и экспоненциальная аппроксимация с коэффициентом затухания $k = 5.67 \text{ мм}^{-1}$ (а); флуктуация А-скана относительно экспоненциального тренда со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0.11$ (б) (цвет онлайн)

Fig. 7. Data for a sample modified by ultrasonic radiation with a frequency of 44 kHz: OCT response and exponential approximation with an attenuation coefficient $k = 5.67 \text{ mm}^{-1}$ (a); A-scan fluctuation relative to the exponential trend with a standard deviation $\sigma = 0.11$ (b) (color online)

свойства слоя полимера. Коэффициент затухания, который определяется рассеянием света в образце, в среднем уменьшается на 11% при обработке ультразвуком на частоте 44 кГц, на 3% при обработке ультразвуком на частоте 22 кГц, на 10.5% при воздействии СВЧ излучения частотой 2450МГц и увеличивается на 0.55% при обработке СВЧ на частоте 915МГц.

При этом максимальный эффект достигается в случае применения в качестве модифицирующего

фактора ультразвукового излучения с частотой 44 кГц и плотностью мощности 10 Вт/см^2 . Возможный физический механизм убывания коэффициента затухания в ближней ИК области связан с повышением уровня однородности структуры полимерной составляющей на супрамолекулярном уровне (и, соответственно, уменьшением коэффициента рассеяния зондирующего излучения в слое полимера).

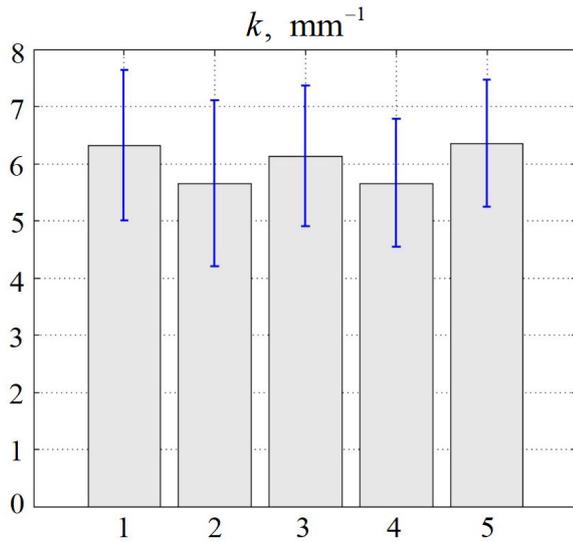


Рис. 8. Значения коэффициента затухания k : 1 – для контрольных образцов; 2, 3 – для образцов, прошедших обработку ультразвуком на частотах 44 и 22 кГц соответственно; 4, 5 – для образцов, модифицированных с помощью СВЧ излучения на частотах 2450 и 915 МГц соответственно

Fig. 8. Values of the attenuation coefficient k : 1 – for control samples; 2, 3 – for samples treated with ultrasound at the frequencies of 44 and 22 kHz; 4, 5 – for samples modified using microwave radiation at the frequencies of 2450 and 915 MHz

Среднеквадратичные значения флуктуаций ОКТ-сигналов (рис. 9) снижаются по сравнению с данными контрольного образца на 11.2% для образцов, обработанных на частоте 915 МГц, на 4.3% для образцов, прошедших обработку на частоте 2450 МГц, на 7.5% для материалов, модифицированных ультразвуком на частоте 22 кГц и на 2.5% для обработки на частоте 44 кГц. Соответственно, можно сделать вывод, что СВЧ и УЗ модификация полимерной составляющей в образцах композита не приводят к существенным изменениям коэффициента затухания зондирующего излучения в полимерной основе композита. Аналогичным образом несущественно изменяется среднеквадратичное значение флуктуационной составляющей, обусловленной эффектом спекл-модуляции ОКТ-сигнала вследствие многократного рассеяния.

В то же время было установлено, что эффект модификации проявляется в существенном изменении характера отражения зондирующего излучения на границах раздела «углеродное волокно – полимерная составляющая» в объеме образца. В частности, существенно уменьшается амплитуда всплесков ОКТ-сигнала на этих границах (рис. 10). Для количественных оценок этого

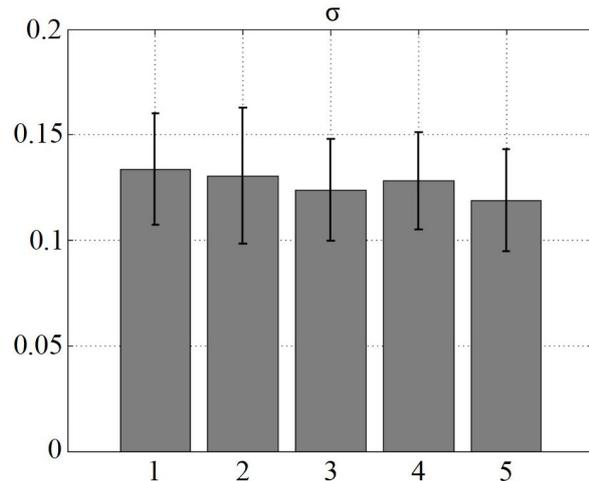


Рис. 9. Среднеквадратичные значения σ флуктуаций ОКТ-сигнала: 1 – для контрольных образцов; 2, 3 – для образцов, прошедших обработку ультразвуком на частотах 44 и 22 кГц соответственно; 4, 5 – для образцов, модифицированных с помощью СВЧ излучения на частотах 2450 и 915 МГц соответственно

Fig. 9. Values of the standard deviation σ of A-scan fluctuations: 1 – from the exponential trend for control samples; 2, 3 – for samples treated with ultrasound at frequencies of 44 and 22 kHz; 4, 5 – for samples modified using microwave radiation at frequencies of 2450 (4) and 915 MHz

эффекта для полученных В-сканов использовались отношения суммарной длины участков L^* , на которых идентифицируются границы раздела «волокно – полимер», к длине трассы сканирования L (рис. 10).

На рис. 10, а представлен фрагмент В-скана образца с ярко выраженными участками границ раздела «полимер-волокно». В то же время на рис. 10, б высокоамплитудные всплески ОКТ-сигнала в объеме зондируемого образца практически отсутствуют (изменение показателя преломления материала в областях вблизи границы раздела имеет плавный характер, и высокоамплитудные всплески ОКТ-сигнала существенно сглаживаются). Эта особенность предположительно обусловлена частичной диффузией полимера в объем углеродных волокон в результате модификации.

При анализе полученных значений наблюдаются существенные отличия характеристик модифицированных и контрольных образцов по введённому критерию L^*/L (рис. 11), т. е. относительная протяженность ярко выраженных границ после модификации значительно уменьшается. Анализ полученных данных показал снижение (по сравнению с контрольными образцами): на 70% для образцов после УЗ обработки на частоте 22 кГц, на 68% для образцов после СВЧ

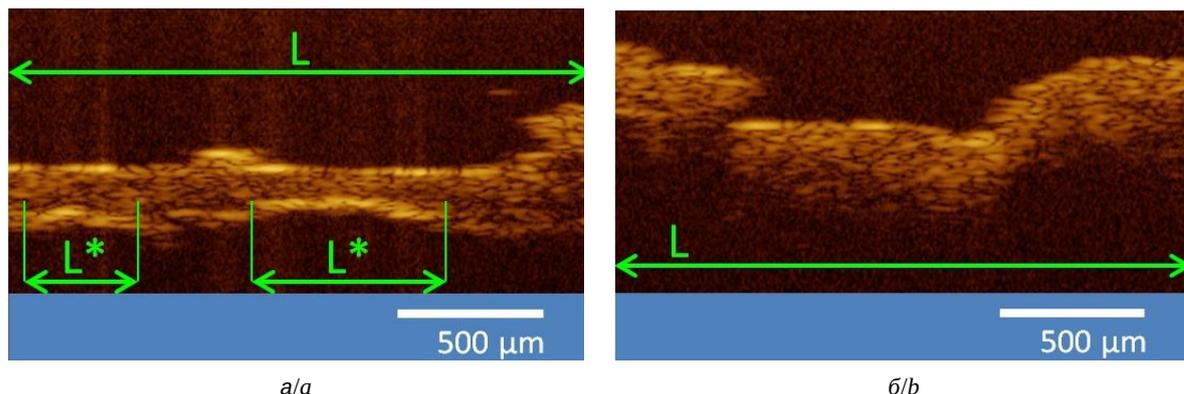


Рис. 10. Фрагменты В-скана контрольного образца (а) и прошедшего обработку СВЧ излучением на частоте 2450 МГц (б) (цвет онлайн)

Fig. 10. Fragments of the B-scan of the control sample (a) and the one processed by microwave radiation at a frequency of 2450 MHz (b) (color online)

обработки на частоте 2450 МГц, на 42% для образца, прошедшего УЗ обработку на частоте 44 кГц, на 40% при СВЧ обработке на частоте 915 МГц.

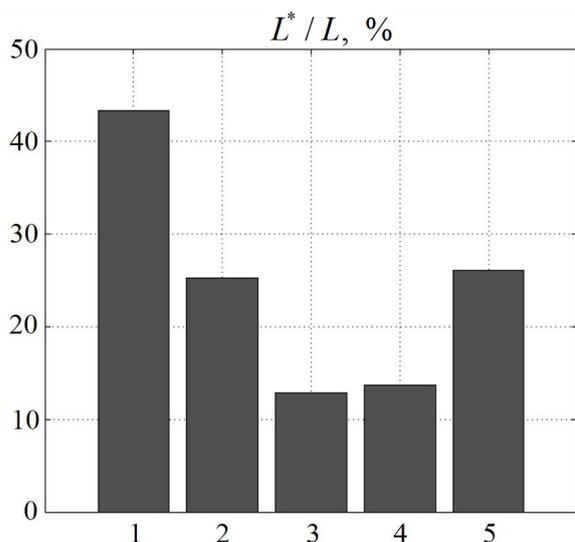


Рис. 11. Значения относительной протяженности фрагментов границы с резким скачком ОКТ-сигнала: 1 – для контрольных образцов; 2, 3 – для образцов, прошедших обработку ультразвуком на частотах 44 и 22 кГц соответственно; 4, 5 – для образцов, модифицированных с помощью СВЧ излучения на частотах 2450 и 915 МГц

Fig. 11. Values of the relative length of boundary fragments with a sharp jump in the refractive index to the total length of the sample: 1 – for control samples; 2, 3 – for samples treated with ultrasound at frequencies of 44 and 22 kHz; 4, 5 – for samples modified using microwave radiation at frequencies of 2450 and 915 MHz

В таблице систематизированы результаты проведенного анализа В-сканов. Это дает возможность сопоставить данные, выявить закономерности и определить наиболее информативные параметры для количественной оценки эффективности электрофизической обработки образцов.

Цифрами обозначены: 1 – контрольные образцы; 2 – образцы, прошедшие обработку ультразвуком на частоте 44 кГц; 3 – образцы, прошедшие обработку ультразвуком на частоте 22 кГц; 4 – образцы, модифицированные с помощью СВЧ излучения на частоте 2450 МГц; 5 – образцы, модифицированные с помощью СВЧ излучения на частоте 915 МГц.

Результаты оценки диагностических параметров для контрольных и модифицированных образцов углепластового композита, исследованных методом низкокогерентной рефлектометрии

Summary table of the results of evaluation of optical parameters of carbon fiber reinforced plastic, which were studied by the low-coherence reflectometry method

Образец / Sample	k, mm^{-1}	σ	$L^*/L, \%$
1	6.31 ± 1.32	0.13 ± 0.02	43.33
2	5.65 ± 1.44	0.13 ± 0.03	25.23
3	6.13 ± 1.23	0.12 ± 0.02	12.88
4	5.65 ± 1.11	0.12 ± 0.02	13.71
5	6.35 ± 1.10	0.11 ± 0.02	26.07

Выводы

В работе представлены результаты исследования идентифицируемых с помощью низкокогерентной рефлектометрии структурных изменений, происходящих в полимерных композитных материалах при их модификации ультразвуковым и СВЧ воздействием. Полученные данные позволяют сделать вывод о несущественных изменениях коэффициента затухания и среднеквадратичного значения флуктуационной составляющей регистрируемого ОКТ-сигнала. Напротив,



в результате модификации существенно уменьшается относительная протяженность идентифицируемых участков границ раздела «углеродное волокно – полимер».

Выявленные особенности структуры ПМК после модификации состоят в следующем.

1. При электрофизической обработке на различных режимах коэффициент затухания в среднем незначительно уменьшается по сравнению с контрольным образцом. Это может свидетельствовать о небольшом возрастании степени однородности структуры полимерной матрицы. Наиболее существенное уменьшение наблюдается для образцов, обработанных ультразвуком на частоте 44 кГц, и составляет 14,5% от коэффициента затухания для контрольных образцов.

2. Среднеквадратичные значения флуктуационной составляющей сигнала изменяются в интервале 2,5–11,2% в сравнении с контрольным образцом.

3. В результате модификации уменьшается относительная протяженность участков границ раздела «углеродное волокно – полимер», идентифицируемых по резким скачкам ОКТ- сигнала. Наибольший эффект достигается при СВЧ модификации на частоте 2450 МГц; при этом относительная протяженность идентифицируемых участков составляет $\approx 0,13$, что в $\approx 3,4$ раза меньше соответствующей величины для контрольного образца.

Примененный метод исследования может быть использован для анализа морфологических изменений образцов полимерных композиционных материалов в результате различных модифицирующих воздействий.

Список литературы

1. Филатов А. И. Мировой рынок полимерных композиционных материалов: состояние, тенденции, перспективы. Ч. 3 // Полимерные материалы. 2025. № 7 (314). С. 24–29.
2. JEC Observer. Overview of the global composites market // JEC Composite Magazine. 2019. Special Issue. P. 60.
3. JEC Observer. Overview of the global composites market 2023–2028 // JEC Composite Magazine. 2024. Special Issue. P. 60.
4. JEC Observer. Overview of the global composites market 2024–2029 // JEC Composite Magazine. 2025. Special Issue. P. 72.
5. Fitch Solutions downgrades global steel price forecast for 2024 : [сайт]. URL: <https://www.steelorbis.com/steel-news/latest-news/fitch-solutions-downgrades-global-steel-price-forecast-for-2024-1356645.htm> (дата обращения: 30.05.2025).
6. Сотов А. В., Зайцев А. И., Абдрахманова А. Э., Попович А. А. Аддитивное производство непрерывно армированных полимерных композитов с использованием промышленных роботов : обзор // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2024. Т. 18, № 1. С. 20–30. <https://doi.org/10.17073/1997-308X-2024-1-20-30>
7. Чулков А. О., Вавилов В. П., Кладов Д. Ю., Юркина В. А. Тепловой неразрушающий контроль композиционных и металлических деталей, изготовленных методом аддитивных технологий // Дефектоскопия. 2022. № 11. С. 50–55. <https://doi.org/10.31857/S0130308222110069>
8. Торубаров И. С. Технология аддитивного производства изделий с повышенными механическими характеристиками, армированных непрерывным волокном по пространственным траекториям : дис. ... канд. техн. наук: 2.5.6 / Волгоградский государственный технический университет. Волгоград, 2024. 160 с.
9. Шкуро А. Е., Кривоногов П. С. Технологии и материалы 3D-печати : учеб. пособие. Екатеринбург : Издательство Уральского государственного лесотехнического университета, 2017. 99 с.
10. Галыгин В. Е., Баронин Г. С., Таров В. П., Завражин Д. О. Современные технологии получения и переработки полимерных и композиционных материалов : учеб. пособие. Тамбов : Издательство Тамбовского государственного технического университета, 2012. 180 с.
11. Jamora C., Rauch V., Kravchenko S. G., Kravchenko O. G. Effect of resin bleed out on compaction behavior of the fiber tow gap region during automated fiber placement manufacturing // Polymers. 2023. Vol. 16, № 31. P. 1–18. <https://doi.org/10.3390/polym16010031>
12. Lionetto F., Dell'Anna R., Montagna F., Maffezzoli A. Ultrasonic assisted consolidation of commingled thermoplastic/glass fiber rovings // Front. Mater. 2015. Vol. 2. P. 1–19. <https://doi.org/10.3389/fmats.2015.00032>
13. Nurullaev E. M., Oniskiv V. D. Mechanical characteristics of a polymer composite material based on gamma-irradiated low-molecular-weight rubbers // Radiat. Chem. 2021. Vol. 55. P. 150–154. <https://doi.org/10.1134/S0018143921020107>
14. Кербер М. Л., Виноградов В. М., Головкин Г. С. Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технология : учеб. пособие / под ред. А. А. Берлина. 3-е изд., испр. СПб. : Профессия, 2011. 560 с.
15. Барашков Н. Н. Полимерные композиты: получение, свойства, применение / отв. ред. Я. М. Колотыркин, Ю. К. Годовский. М. : Наука, 1984. 128 с.
16. Алешин Н. П., Григорьев М. В., Щипаков Н. А. Современное оборудование и технологии неразрушающего контроля ПКМ // Инженерный вестник. 2015. № 1. С. 233–238. EDN: TQMOVH
17. Федотов М. Ю. Теоретические исследования встроенной волоконно-оптической системы контроля деформации и температуры полимерных композитов //



- Контроль и диагностика. 2023. № 5. С. 14–25. <https://doi.org/10.14489/td.2023.05.pp.014-025>
18. Януш О. В., Деркачева О. Ю., Гусарова Т. С. Оптическая спектроскопия полимеров : учеб. пособие. СПб. : Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, 2017. 47 с.
 19. Еремин А. В. Мониторинг оптическим и акустическим методами состояния армированных полимерных и металлических материалов при усталостном разрушении : дис. ... канд. техн. наук: 05.11.13 / Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Томск, 2018. 166 с.
 20. Михеев П. В., Бухаров С. В., Лебедев А. К., Сундер Р. Неразрушающий контроль полимерных композиционных материалов методом вихретоковой дефектоскопии в процессе циклического нагружения // Инженерный журнал: наука и инновации. 2023. № 11. С. 1–13. <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2023-11-2314>
 21. Маркевич И. А., Дрокин Н. А., Селютин Г. Е. Исследование методом импедансной спектроскопии полимерного композита с углеродными нанотрубками в контакте с электролитом // ЖТФ. 2019. Т. 89, вып. 9. С. 1400–1405. <https://doi.org/10.21883/JTF.2019.09.48066.42-19>
 22. Буй Ван Донг. Акустический контроль композитных материалов малоракурсным теневым методом : дис. ... канд. техн. наук: 05.11.13 / Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Томск, 2015. 145 с.
 23. Bashkov O. V., Protsenko A. E., Bryanskii A. A., Romashko R. V. Diagnostics of polymer composite materials and analysis of their production technology by using the method of acoustic emission // Mech. Compos. Mater. 2017. Vol. 53. P. 533–540. <https://doi.org/10.1007/s11029-017-9683-7>
 24. Баршутина М. Н., Баршутин С. Н. Магнитно-полевой резонансно-туннельный метод измерения концентрации наночастиц в полимерных композитах // Вестник ТГТУ. 2018. Т. 24, № 1. С. 24–29. <https://doi.org/10.17277/vestnik.2018.01.pp.024-029>
 25. Мельников Г. Ю., Лепаловский В. Н., Курляндская Г. В. Магнитный импеданс пленочных наноструктур для оценки полей рассеяния микрочастиц магнитных композитов // ЖТФ. 2022. Т. 92, вып. 2. С. 321–326. <https://doi.org/10.21883/JTF.2022.02.52024.259-21>
 26. Ходакова Н. Н., Самойленко В. В., Блазнов А. Н., Бычин Н. В. Термоаналитические исследования полимерного композиционного материала // Ползуновский вестник. 2016. № 4–1. С. 218–224. EDN: YHХHJ
 27. Антюфеева Н. В., Славин А. В., Большаков В. А. Практическое применение термического анализа при разработке и исследовании полимерных композиционных материалов // Пластические массы. 2019. № 3–4. С. 25–27. <https://doi.org/10.35164/0554-2901-2019-3-4-25-27>
 28. Майникова Н. Ф. Методы и средства неразрушающего теплового контроля температурно-временных характеристик структурных превращений в полимерных материалах: автореф. дис. ... д-ра техн. наук: 05.11.13 / Тамбовский государственный технический университет. Тамбов, 2007. 33 с.
 29. Мищенко С. В., Малков Н. А. Проектирование радиоволновых (СВЧ) приборов неразрушающего контроля материалов : учеб. пособие. Тамбов : Издательство ТГТУ, 2003. 128 с.
 30. Андреев И. Д., Лобанова И. С. Методы неразрушающего контроля изделий из полимерных композиционных материалов // Актуальные проблемы авиации и космонавтики. 2016. Т. 1. С. 295–296. EDN: WTNTIN
 31. Гуров И. П., Жукова Е. В., Маргарянц Н. Б. Исследование внутренней микроструктуры материалов методом оптической когерентной микроскопии с перестраиваемой длиной волны // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2012. № 3 (79). С. 40–45.
 32. Trunina N. A., Lychagov V. V., Tuchin V. V. OCT monitoring of diffusion of clearing agents within tooth dentin // Proc. SPIE. 2009. Vol. 7443. Art. 74432D. <https://doi.org/10.1117/12.828646>
 33. Trunina N. A., Lychagov V. V., Tuchin V. V. OCT monitoring of diffusion of water and glycerol through tooth dentin in different geometry of wetting // Proc. SPIE. 2010. Vol. 7563. Art. 75630U. <https://doi.org/10.1117/12.848585>
 34. Трунина Н. А., Лычагов В. В., Тучин В. В. Исследование диффузии воды через дентин зуба человека методом оптической когерентной томографии // Оптика и спектроскопия. 2010. Т. 109, № 2. С. 190–196. EDN: MTJCGV
 35. Трунина Н. А., Тучин В. В. Визуализация проникновения наночастиц TiO₂ в ткани зуба человека методом оптической когерентной томографии // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2011. Т. 11, вып. 2. С. 5–9. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2011-11-2-5-9>
 36. Быков А. В., Волков М. В., Вольинский М. А., Гуров И. П., Киннунен М., Маргарянц Н. Б., Попов А. П. Изготовление тканемитирующих фантомов и капилляров и их исследование методом оптической когерентной томографии // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2013. № 2 (84). С. 98–103.
 37. Bini M., Ignesti A., Millanta L., Olmi R., Rubino N., Vanni R. The polyacrylamide as a phantom material for electromagnetic hyperthermia studies // IEEE Trans. Biomed. Eng. 1984. Vol. 31, iss. 3. P. 317–322. <https://doi.org/10.1109/TBME.1984.325271>
 38. Surowiec A., Shrivastava P., Astrahan M., Petrovick Z. Utilization of a multilayer polyacrylamide phantom for evaluation of hyperthermia applicators // Int. J. Hyperthermia. 1992. Vol. 8, iss. 6. P. 795–807. <https://doi.org/10.3109/02656739209005027>
 39. Royston D., Poston R., Prah S. Optical properties of scattering and absorbing materials used in the development of optical phantoms at 1064 nm // J. Biomed. Opt. 1996. Vol. 1, iss. 1. P. 110–116. <https://doi.org/10.1117/12.227698>



40. Iizuka M., Sherar M., Vitkin I. Optical phantom materials for near infrared laser photocoagulation studies // *Lasers Surg. Med.* 1999. Vol. 25, iss. 2. P. 159–169. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1096-9101\(1999\)25:2<159::aid-lsm10>3.0.co;2-v](https://doi.org/10.1002/(sici)1096-9101(1999)25:2<159::aid-lsm10>3.0.co;2-v)
41. Kharine A., Manohar S., Seeton R., Kolkman R., Bolt R., Steenbergen W., de Mul F. Poly(vinyl alcohol) gels for use as tissue phantoms in photoacoustic mammography // *Phys. Med. Biol.* 2003. Vol. 48, iss. 3. P. 357–370. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/48/3/306>
42. De Korte C. L., Céspedes E. I., van der Steen A. F., Norder B., te Nijenhuis K. Elastic and acoustic properties of vessel mimicking material for elasticity imaging // *Ultrason. Imaging.* 1997. Vol. 19, iss. 2. P. 112–126. <https://doi.org/10.1177/016173469701900202>
43. Tomlins P., Woolliams P., Tedaldi M., Beaumont A., Hart C. Measurement of the 3D point-spread function in an OCT imaging system // *Proc. SPIE.* 2008. Vol. 6847. Art. 68472Q. <https://doi.org/10.1117/12.766576>
44. Zeppieri M., Marsili S., Enaholo E. S., Shuaibu A. O., Uwagboe N., Salati C., Spadea L., Musa M. Optical Coherence Tomography (OCT): A Brief Look at the Uses and Technological Evolution of Ophthalmology. *Medicina (Kaunas)*. 2023. Vol. 3, iss. 12. art. 2114. <https://doi.org/10.3390/medicina59122114>
45. Varghese M., Varghese S., Preethi S. Revolutionizing medical imaging: A comprehensive review of optical coherence tomography (OCT). *Journal of Optics.* 2025. Vol. 54, iss. 3. P. 1178–1195. <https://doi.org/10.1007/s12596-024-01765-6>
46. Bouma B. E., de Boer J. F., Huang D., Jang I. K., Yonetsu T., Leggett C. L., Leitgeb R., Sampson D. D., Suter M., Vakoc B., Villiger M., Wojtkowski M. Optical coherence tomography. *Nat. Rev. Methods Primers.* 2022. Vol. 2. Art. 79. <https://doi.org/10.1038/s43586-022-00162-2>
47. Злобина И. В., Бекренев Н. В. О механизме повышения механических характеристик отвержденных полимерных композиционных материалов под действием СВЧ электромагнитного // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика.* 2022. Т. 22, вып. 2. С. 158–169. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-2-158-169>
48. Злобина И. В., Бекренев Н. В., Чуриков Д. О. Эффективность влияния СВЧ-излучения и конвекционного нагрева на релаксацию внутренних напряжений в отвержденных полимерных композиционных материалах // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика.* 2025. Т. 25, вып. 2. С. 230–241. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-2-230-241>
49. Злобина И. В., Бекренев Н. В., Игнатьев М. А. Анализ особенностей микроструктуры полимерной матрицы в составе ПКМ, сформированных под влиянием электрофизических воздействий // *Пластические массы.* 2024. № 2. С. 12–16. <https://doi.org/10.35164/0554-2901-2024-02-12-16>
50. Злобина И. В., Бекренев Н. В., Егоров А. С. Влияние электрофизических воздействий на микроструктуру торцевой поверхности отвержденного монослоя // *Конструкции из композиционных материалов.* 2024.

№ 1 (173). С. 29–35. <https://doi.org/10.52190/2073-2562-2024-1-29>

References

1. Filatov A. I. The global market of polymer composite materials: State, trends, prospects. Part 3. *Polimernye Materialy* [Polymer materials]. 2025, no. 7 (314), pp. 24–29 (in Russian).
2. JEC Observer. Overview of the global composites market. *JEC Composite Magazine*, 2019, Spec. iss., pp. 60.
3. JEC Observer. Overview of the global composites market 2023–2028. *JEC Composite Magazine*, 2024, Spec. iss., pp. 60.
4. JEC Observer. Overview of the global composites market 2024–2029. *JEC Composite Magazine*, 2025, Spec. iss., pp. 72.
5. *Fitch Solutions downgrades global steel price forecast for 2024*. Site. Available at: <https://www.steelorbis.com/steel-news/latest-news/fitch-solutions-downgrades-global-steel-price-forecast-for-2024-1356645.htm> (accessed May 30, 2025).
6. Sotov A. V., Zaitsev A. I., Abdrakhmanova A. E., Popovich A. A. Additive manufacturing of continuously reinforced polymer composites using industrial robots: A review. *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya* [Powder Metallurgy and Functional Coatings], 2024, vol. 18, no. 1, pp. 20–30 (in Russian). <https://doi.org/10.17073/1997-308X-2024-1-20-30>
7. Chulkov A. O., Vavilov V. P., Klodov D. Yu., Yurkina V. A. Thermal non-destructive testing of composite and metallic parts manufactured by using additive technologies. *Defektoskopiya* [Flaw detection], 2022, no. 11, pp. 50–55 (in Russian). <https://doi.org/10.31857/S0130308222110069>
8. Torubarov I. S. *Technology of additive manufacturing of parts with enhanced mechanical properties, continuously fiber-reinforced along spatial trajectories*. Diss. Cand. Sci. (Eng.). Volgograd, 2024. 160 p. (in Russian).
9. Shkuro A. E., Krivonogov P. S. *Tekhnologii i materialy 3D-pechati* [3D printing technologies and materials: Textbook]. Ekaterinburg, Ural State Forest Engineering University Publ., 2017. 99 p. (in Russian).
10. Galygin V. E., Baronin G. S., Tarov V. P., Zavrzhin D. O. *Sovremennye tekhnologii polucheniya i pererabotki polimernykh i kompozitsionnykh materialov* [Modern technologies for production and processing of polymeric and composite materials: Textbook]. Tambov, TGTU Publ., 2012. 180 p. (in Russian).
11. Jamora C., Rauch V., Kravchenko S. G., Kravchenko O. G. Effect of resin bleed out on compaction behavior of the fiber tow gap region during automated fiber placement manufacturing. *Polymers*, 2023, vol. 16, no. 1, pp. 1–18. <https://doi.org/10.3390/polym16010031>
12. Lionetto F., Dell'Anna R., Montagna F., Maffezzoli A. Ultrasonic assisted consolidation of commingled thermoplastic/glass fiber rovings. *Frontiers in Materials*, 2015, vol. 2, pp. 1–19. <https://doi.org/10.3389/fmats.2015.00032>



13. Nurullaev E. M., Oniskiv V. D. Mechanical characteristics of a polymer composite material based on gamma-irradiated low-molecular-weight rubbers. *High Energy Chemistry*, 2021, vol. 55, pp. 150–154. <https://doi.org/10.1134/S0018143921020107>
14. Kerber M. L., Vinogradov V. M., Golovkin G. S. *Polimernye kompozitsionnye materialy: struktura, svoistva, tekhnologiya* [Polymer Composite Materials: Structure, Properties, Technology. Ed/ by A. A. Berlin. 3rd ed.]. Saint Petersburg, Professiya, 2011. 560 p.
15. Barashkov N. N. *Polimernye kompozity: poluchenie, svoistva, primeneniye* [Polymer Composites: Production, Properties, Applications. Ed. by Ya. M. Kolotyrykin, Yu. K. Godovskii]. Moscow, Nauka, 1984. 128 p. (in Russian).
16. Aleshin, N. P., Grigoryev, M. V., Shchipakov, N. A. Modern equipment and technologies for non-destructive testing of polymer composites. *Inzhenernyy vestnik* [Engineering Bulletin], 2015, no. 1, pp. 233–238 (in Russian). EDN: TQMOBH
17. Fedotov M. Yu. Theoretical researches of the embedded fiber-optic system of testing deformation and temperature of polymer composites. *Kontrol'. Diagnostika* [Testing. Diagnostics], 2023, no. 5, pp. 14–25 (in Russian). <https://doi.org/10.14489/td.2023.05.pp.014-025>
18. Yanush O. V., Derkacheva O. Yu., Gusarova T. S. *Opticheskaya spektroskopiya polimerov* [Optical Spectroscopy of Polymers: Textbook]. Saint Petersburg, Saint Petersburg State University of Industrial Technologies and Design Publ., 2017. 47 p.
19. Eremin A. V. *Monitoring the condition of reinforced polymeric and metallic materials under fatigue failure by optical and acoustic methods*. Diss. ... Cand. Sci. (Eng.). Tomsk, 2018. 166 p. (in Russian).
20. Mikheev P. V., Bukharov S. V., Lebedev A. K., Sunder R. The eddy current flaw detection non-destructive testing of polymer composite materials in cyclic loading. *Inzhenernyi Zhurnal: Nauka i Innovatsii* [Engineering Journal: Science and Innovation], 2023, no. 11, pp. 1–13 (in Russian). <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2023-11-2314>
21. Markevich I. A., Selyutin G. E., Drokin N. A. Impedance spectroscopy study of a polymer composite with carbon nanotubes in contact with an electrolyte. *Technical Physics*, 2019, vol. 64, no. 9, pp. 1324–1329. <https://doi.org/10.1134/S1063784219090093>
22. Bui Van Dong. *Acoustic inspection of composite materials by a limited-angle shadow method*. Diss. ... Cand. Sci. (Eng.). Tomsk, 2015. 145 p. (in Russian).
23. Bashkov O. V., Protsenko A. E., Bryanskii A. A., Romashko R. V. Diagnostics of Polymer Composite Materials and Analysis of Their Production Technology by Using the Method of Acoustic Emission. *Mech. Compos. Mater.*, 2017, vol. 53, pp. 533–540. <https://doi.org/10.1007/s11029-017-9683-7>
24. Barshtutina M. N., Barshtutin S. N. A magnetic field resonant tunneling method for measuring the concentration of the nanoparticles in the polymer composites. *Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2018, vol. 24, no. 1, pp. 24–29 (in Russian). <https://doi.org/10.17277/vestnik.2018.01.pp.024-029>
25. Melnikov G. Yu., Lepalovskij V. N., Kurlyandskaya G. V. Magnetic impedance of film nanostructures for stray magnetic field evaluation of microparticles in magnetic composites. *Technical Physics*, 2023, vol. 68 (Suppl. 3), pp. S568–S573. <https://doi.org/10.1134/S1063784223900875>
26. Khodakova N. N., Samoilenko V. V., Blaznov A. N., Bychin N. V. Thermoanalytical studies of a polymer composite material. *Polzunovskiy vestnik*, 2016, no. 4–1, pp. 218–224. EDN: YHXHJJ
27. Antyufeeva N. V., Slavin A. V., Bolshakov V. A. Practical application of thermal analysis in the development and study of polymer composites. *Plasticheskie Massy*, 2019, no. 3–4, pp. 25–27. <https://doi.org/10.35164/0554-2901-2019-3-4-25-27> (in Russian).
28. Maiknikova N. F. *Methods and means of non-destructive thermal monitoring of temperature-time characteristics of structural transformations in polymeric materials*. Thesis Diss. ... Dr. Sci. (Eng.). Tambov, 2007. 35 p. (in Russian).
29. Mishchenko S. V., Malkov N. A. *Proektirovanie radiovolnovykh (SVCh) priborov nerazrushayushchego kontrolya materialov: Uchebnoe posobie* [Design of radio-wave (microwave) instruments for non-destructive material testing: Textbook]. Tambov, TGTU Publ., 2003. 128 p. (in Russian).
30. Andreev I. D., Lobanova I. S. Non-destructive testing methods of composite materials. *Aktual'nye problemy aviatsii i kosmonavтики* [Current Issues in Aviation and Cosmonautics], 2016, vol. 1, pp. 295–296 (in Russian). EDN: WTNTIN
31. Gurov I. P., Zhukova E. V., Margaryants N. B. Investigation of materials internal microstructure by optical coherence microscopy with a tunable wavelength. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2012, no. 3 (79), pp. 40–45 (in Russian).
32. Trunina N. A., Lychagov V. V., Tuchin V. V. OCT monitoring of diffusion of clearing agents within tooth dentin. *Proc. SPIE*, 2009, vol. 7443, art. 74432D. <https://doi.org/10.1117/12.828646>
33. Trunina N. A., Lychagov V. V., Tuchin V. V. OCT monitoring of diffusion of water and glycerol through tooth dentin in different geometry of wetting. *Proc. SPIE*. 2010, vol. 7563, art. 75630U. <https://doi.org/10.1117/12.848585>
34. Trunina N. A., Lychagov V. V., Tuchin V. V. Study of water diffusion in human dentin by optical coherent tomography. *Optics and Spectroscopy*, 2010, vol. 109, no 2, pp. 162–168. <https://doi.org/10.1134/S0030400X10080035>
35. Trunina N. A., Tuchin V. V. Visualization of Penetration of TiO₂ Nanoparticles into Tooth Tissues Samples Using Optical Coherence Tomography. *Izvestia of Saratov University. Physics*, 2011, vol. 11, iss. 2, pp. 5–9. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2011-11-2-5-9>
36. Bykov A. V., Volkov M. V., Volynsky M. A., Gurov I. P., Kinnunen M., Margaryants N. B., Popov A. P. Fabrication of tissue-simulative phantoms and capillaries and their investigation by optical coherence tomography techniques. *Scientific and Technical Journal of Information*



- Technologies, Mechanics and Optics*, 2013, vol. 13, no. 2, pp. 98–103 (in Russian).
37. Bini M., Ignesti A., Millanta L., Olmi R., Rubino N., Vanni R. The polyacrylamide as a phantom material for electromagnetic hyperthermia studies. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 1984, vol. 31, iss. 3, pp. 317–322. <https://doi.org/10.1109/TBME.1984.325271>
 38. Surowiec A., Shrivastava P., Astrahan M., Petrovick Z. Utilization of a multilayer polyacrylamide phantom for evaluation of hyperthermia applicators. *Int. J. Hyperthermia*, 1992, vol. 8, iss. 6, pp. 795–807. <https://doi.org/10.3109/02656739209005027>
 39. Royston D., Poston R., Prah S. Optical properties of scattering and absorbing materials used in the development of optical phantoms at 1064 nm. *J. Biomed. Opt.*, 1996, vol. 1, iss. 1, pp. 110–116. <https://doi.org/10.1117/12.227698>
 40. Iizuka M., Sherar M., Vitkin I. Optical phantom materials for near infrared laser photocoagulation studies. *Lasers Surg. Med.*, 1999, vol. 25, iss. 2, pp. 159–169. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1096-9101\(1999\)25:2<159::aid-lsm10>3.0.co;2-v](https://doi.org/10.1002/(sici)1096-9101(1999)25:2<159::aid-lsm10>3.0.co;2-v)
 41. Kharine A., Manohar S., Seeton R., Kolkman R., Bolt R., Steenbergen W., de Mul F. Poly(vinyl alcohol) gels for use as tissue phantoms in photoacoustic mammography. *Phys. Med. Biol.*, 2003, vol. 48, iss. 3, pp. 357–370. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/48/3/306>
 42. De Korte C. L., Céspedes E. I., van der Steen A. F., Norder B., te Nijenhuis K. Elastic and acoustic properties of vessel mimicking material for elasticity imaging. *Ultrason. Imaging*, 1997, vol. 19, iss. 2, pp. 112–126. <https://doi.org/10.1177/016173469701900202>
 43. Tomlins P., Woolliams P., Tedaldi M., Beaumont A., Hart C. Measurement of the 3D point-spread function in an OCT imaging system. *Proc. SPIE*, 2008, vol. 6847, art. 68472Q. <https://doi.org/10.1117/12.766576>
 44. Zeppleri M., Marsili S., Enaholo E. S., Shuaibu A. O., Uwagboe N., Salati C., Spadea L., Musa M. Optical coherence tomography (OCT): A brief look at the uses and technological evolution of Ophthalmology. *Medicina (Kaunas)*, 2023, vol. 3, iss. 12, art. 2114. <https://doi.org/10.3390/medicina59122114>
 45. Varghese M., Varghese S., Preethi S. Revolutionizing medical imaging: A comprehensive review of optical coherence tomography (OCT). *Journal of Optics.*, 2025, vol. 54, iss. 3, pp. 1178–1195. <https://doi.org/10.1007/s12596-024-01765-6>
 46. Bouma B. E., de Boer J. F., Huang D., Jang I. K., Yonetsu T., Leggett C. L., Leitgeb R., Sampson D. D., Suter M., Vakoc B., Villiger M., Wojtkowski M. Optical coherence tomography. *Nat. Rev. Methods Primers*, 2022, vol. 2, art. 79. <https://doi.org/10.1038/s43586-022-00162-2>
 47. Zlobina I. V., Bekrenev N. V. On the mechanism of increasing the mechanical characteristics of cured polymer composite materials under the action of a microwave electromagnetic field. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2022, vol. 22, iss. 2, pp. 158–169 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-2-158-169>
 48. Zlobina I. V., Bekrenev N. V., Churikov D. O. The effectiveness of the effect of microwave radiation and convection heating on the relaxation of internal stresses in cured polymer composite materials. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 2, pp. 230–241 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-2-230-241>
 49. Zlobina I. V., Bekrenev N. V., Ignatiev M. A. Analysis of peculiarities of polymer matrix microstructure in PCMs formed under the influence of electrophysical effects. *Plasticheskie massy*, 2024, no. 2, pp. 12–16 (in Russian). <https://doi.org/10.35164/0554-2901-2024-02-12-16>
 50. Zlobina I. V., Bekrenev N. V., Egorov A. S. The effect of electrophysical influences on the microstructure of the end surface of the cured monolayer. *Konstruktsii iz kompozitsionnykh materialov [Composite material structures]*, 2024. vol. 173, iss. 1, pp. 29–35 (in Russian). <https://doi.org/10.52190/2073-2562-2024-1-29>

Поступила в редакцию 06.10.2025; одобрена после рецензирования 07.11.2025; принята к публикации 21.11.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 06.10.2025; approved after reviewing 07.11.2025; accepted for publication 21.11.2025; published 31.03.2026



БИОФИЗИКА И МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 45–52
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 45–52
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-45-52>, EDN: GIDNCY

Научная статья
УДК 577.3:535.8:535.012:53.06

Измерение коэффициента диффузии флуоресцентного красителя в тканях головного мозга мыши методом восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания

А. И. Дубровский[✉], А. В. Дмитренко, И. В. Федосов, О. В. Семячкина-Глушковская,
С. Б. Вениг

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

Дубровский Александр Ильич, аспирант кафедры оптики и биофотоники Института физики, raskalkamal@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5897-9229>, AuthorID: 1091500

Дмитренко Александр Владимирович, магистрант кафедры физиологии человека и животных биоогического факультета, admitrenko2001@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9906-196X>

Федосов Иван Владленович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры оптики и биофотоники Института физики, fedosov_optics@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3619-245X>, AuthorID: 142277

Семячкина-Глушковская Оксана Валерьевна, доктор биологических наук, заведующий кафедрой физиологии человека и животных биологического факультета, glushkovskaya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6753-7513>, AuthorID: 667773

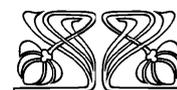
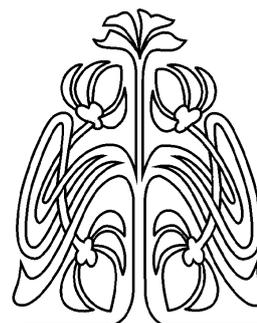
Вениг Сергей Борисович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой материаловедения, технологии и управления качеством Института физики, Sergey.Venig@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4759-5828>, AuthorID: 287170

Аннотация. Диффузионный перенос вещества в тканях головного мозга до сих пор не изучен полностью и представляет большой интерес для современных исследователей в областях биофизики и биомедицины. Процессы диффузии и переноса вещества в тканях головного мозга связаны со свойствами межклеточного пространства центральной нервной системы. Целью данной работы явилась разработка метода измерения коэффициента диффузии, $\text{мкм}^2/\text{с}$, в тканях головного мозга лабораторных мышей *ex vivo* без использования фиксирующих агентов. Проиллюстрирована возможность использования метода восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания на основе мультифотонной микроскопии для анализа подвижности молекул флуоресцентного красителя в тканях головного мозга мышей. Представлены результаты экспериментального исследования динамики восстановления флуоресценции в срезе головного мозга мышей. Продемонстрирована методика составления карты молекулярной диффузии ткани головного мозга лабораторной мыши *ex vivo* на основе мультифотонной микроскопии с возможностью её применения при разнообразном положении в слоях образца в трёхмерном пространстве.

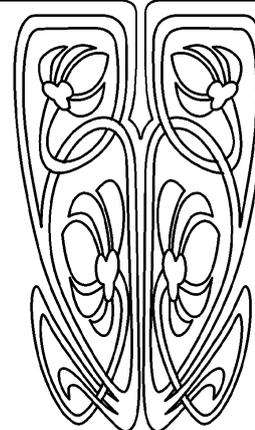
Ключевые слова: диффузия, восстановление флуоресценции после фотообесцвечивания, мультифотонная микроскопия

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-75-30001, <https://rscf.ru/project/23-75-30001/>).

Для цитирования: Дубровский А. И., Дмитренко А. В., Федосов И. В., Семячкина-Глушковская О. В., Вениг С. Б. Измерение коэффициента диффузии флуоресцентного красителя в тканях головного мозга мыши методом восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания //



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 45–52. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-45-52>, EDN: GIDNCY

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

Article

Fuorescent dye diffusion coefficient measurement in murine brain tissues using the method of fluorescence recovery after photobleaching

A. I. Dubrovsky[✉], A. V. Dmitrenko, I. V. Fedosov, O. V. Semyachkina-Glushkovskaya, S. B. Venig

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

Alexander I. Dubrovsky, paskalkamal@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5897-9229>, AuthorID: 1091500

Alexander V. Dmitrenko, admitrenko2001@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9906-196X>

Ivan V. Fedosov, fedosov_optics@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3619-245X>, AuthorID: 142277

Oxana V. Semyachkina-Glushkovskaya, glushkovskaya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6753-7513>, AuthorID: 667773

Sergey B. Venig, Sergey.Venig@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4759-5828>, AuthorID: 287170

Abstract. Background and Objectives: The molecular transport in the brain tissue is yet to be fully studied and presents great interest to the researchers in the fields of biophysics and biomedicine. Diffusion and molecular transport processes in brain tissues are defined by the properties of the intercellular space of the central nervous system. The object of this work is to develop a method for *ex vivo* quantitative measurements of diffusion in the brain tissues of laboratory mice. **Materials and Methods:** Multiphoton microscopy-based fluorescence recovery after photobleaching was applied in the analysis of fluorescent dye molecular mobility dynamics in mouse brain tissue. **Results:** The results of the fluorescence recovery dynamics analysis in an *ex vivo* slab of the mouse brain have been used for molecular diffusion mapping in a layer of brain tissues of a laboratory mouse. Diffusion coefficients in several sections of the layer of brain tissues have been calculated based on a simplified diffusion model and fluorescence recovery after photobleaching data. **Conclusion:** Fluorescence recovery after photobleaching with multiphoton microscopy are applicable in the creation of the molecular diffusion map in the brain tissue of a laboratory mouse.

Keywords: diffusion, fluorescence recovery after photobleaching, multiphoton microscopy

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (Project No. 23-75-30001, <https://rscf.ru/project/23-75-30001/>).

For citation: Dubrovsky A. I., Dmitrenko A. V., Fedosov I. V., Semyachkina-Glushkovskaya O. V., Venig S. B. Fluorescent dye diffusion coefficient measurement in murine brain tissues using the method of fluorescence recovery after photobleaching. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 45–52 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-45-52>, EDN: GIDNCY

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

Введение

Процессы переноса вещества в тканях головного мозга, связанные с ними явления [1–3] и полноценное представление о механизме и скорости диффузии вещества в межклеточном пространстве тканей головного мозга представляет большой интерес в области современных биомедицинских и биофизических исследований. Знание эффективных коэффициентов диффузии и диффузионных свойств также играет важную роль для исследований в области доставки сложных молекул в центральную нервную систему [4]. Измерение эффективного коэффициента диффузии в тканях головного мозга позволяет рассчитать распределение вещества в головном мозге, например, нейротрансмиттеров и нейромодуляторов [5].

Одним из наиболее подходящих методов для изучения (измерения) свойств (характеристик) биологических тканей является мультифотонная микроскопия. Мультифотонная микроскопия применяется в биомедицинских исследованиях [6–8]

для получения количественных и качественных характеристик биоткани, позволяет проводить визуализацию глубоких слоёв интактных образцов сильно рассеивающих тканей на глубине от 200 мкм до 2 мм (в зависимости от ткани), а также для создания трёхмерных моделей структур тканей за счёт визуализации последовательного набора тонких слоёв образца [6, 8]. Данный метод широко применяется для исследования головного мозга [1, 3, 9]. Мультифотонная микроскопия может быть использована совместно с методом восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания для получения численных данных в рамках исследования свойств и параметров биологических образцов.

Восстановление флуоресценции после фотообесцвечивания (Fluorescence recovery after photobleaching, FRAP) является одной из разновидностей методов флуоресцентной микроскопии, применяемых в биомедицинских исследованиях для проведения количественных измерений. Метод FRAP основан на использовании эффекта фото-



обесцвечивания [10–13]. FRAP также относится к одним из самых распространённых методов для изучения подвижности молекул на клеточном и тканевом уровне, измерения собственной или молекулярной диффузии (или коэффициента диффузии в изотропном случае) растворённых веществ в биологических тканях [14]. Комбинация мультифотонной микроскопии и метода FRAP находит применение в современных исследованиях молекулярной диффузии [15, 16], в том числе связанных с молекулярной диффузией в биологических тканях волосковых клеток [17] и головного мозга [18].

Представляет интерес исследование возможности применения простого сочетания методик FRAP и мультифотонной микроскопии без использования микроинъекторов, светового листа, измерения поляризации флуоресценции, отслеживания траекторий движения наночастиц, наноструктур и квантовых точек [18] для составления двухмерной и трёхмерной карт молекулярной диффузии *ex vivo* тканей головного мозга лабораторных мышей на основе упрощённой модели диффузии в биологических тканях.

Цель данной работы заключается в разработке простого в реализации и минимального с точки зрения воздействия на исследуемый образец метода для измерения и составления двухмерной и трёхмерной карты значений эффективного коэффициента диффузии в *ex vivo* тканях головного мозга лабораторных мышей с возможностью последующей адаптации данного метода для проведения измерений *in vivo*. Основной задачей является получение численной информации о диффузии в слоях головного мозга *ex vivo* в виде карты коэффициента диффузии.

1. Материалы и методы

Для проведения эксперимента использовались срезы тканей головного мозга 6-месячных самцов белых BALB/c мышей. Экспериментальные животные были получены в питомнике «Андреевка» ФГБУН НЦБМТ ФМБА России (п.г.т. Андреевка, городской округ Солнечногорск, Московская область, Россия) и содержались в виварии научного медицинского центра ФГБОУ ВО «СГУ имени Н. Г. Чернышевского» в контролируемых условиях: температура $25 \pm 2^\circ\text{C}$, влажность 55% и естественный световой режим (12/12 ч, свет/темнота). При работе с животными соблюдались требования, сформулированные в Директивах Совета Европейского сообщества

2010/63/EU об использовании животных для экспериментальных исследований. Период адаптации животных к условиям содержания в виварии составлял не менее 10 дней. Протокол эксперимента был утвержден локальной этической комиссией.

Осуществлялся коронарный срез для получения образца в виде сегмента головного мозга, включающего кору и подкорковые зоны толщиной 3 мм. Образец погружался в водный раствор 2%-ного флуоресцентного красителя декстран флуоресцеин изотиоцианата (70 кДа, Sigma-Aldrich, USA), помещённого в чашку Петри. По прохождении 15 мин образец погружался во вторую чашку Петри с физиологическим раствором. Покровное стекло располагалось на образце, полностью закрывая его. Чашка Петри с образцом располагалась на моторизированном микроскопном столике под объективом мультифотонного микроскопа Nikon A1R MP (Nikon Corp., Tokyo, Japan). В оптической системе микроскопа использовался объектив Nikon Plan Apo $\lambda 20\times/0.75$ (Nikon Corp., Tokyo, Japan) с 20-кратным увеличением и числовой апертурой 0.75.

Во время визуализации образца микроскоп сканировал 14 слоёв в образце с шагом 1.15 мкм. Источником излучения служил титан-сапфировый перестраиваемый лазер InSight X3 (Spectra-Physics, MKS Inc., USA), настроенный на длину волны излучения 970 нм. Точечное сканирование образца для визуализации осуществлялось в плоскости, параллельной плоскости среза, в области гипоталамуса головного мозга. Разрешение изображения было равно 1.22 мкм на пиксель в плоскости сканирования, а визуализация была ограничена областью размером 512 на 512 пикселей, 624.64 на 624.64 мкм.

Процесс фотообесцвечивания происходил на протяжении 30 с при 5-кратном увеличении мощности лазерного излучения. Линейные размеры области фотообесцвечивания составляли одну пятую от области визуализации в образце (124.93 мкм). Фотообесцвечивание производилось в каждом из 14 визуализируемых слоёв образца.

Предварительное сканирование образца проводилось перед процессом фотообесцвечивания для визуализации исходного состояния флуоресценции. Размер области предварительного сканирования составлял 512 на 512 пикселей (624.64 на 624.64 мкм) с разрешением 1.22 мкм на пиксель. Визуализация восстановления флуоресценции в области с фотообесцвечиванием

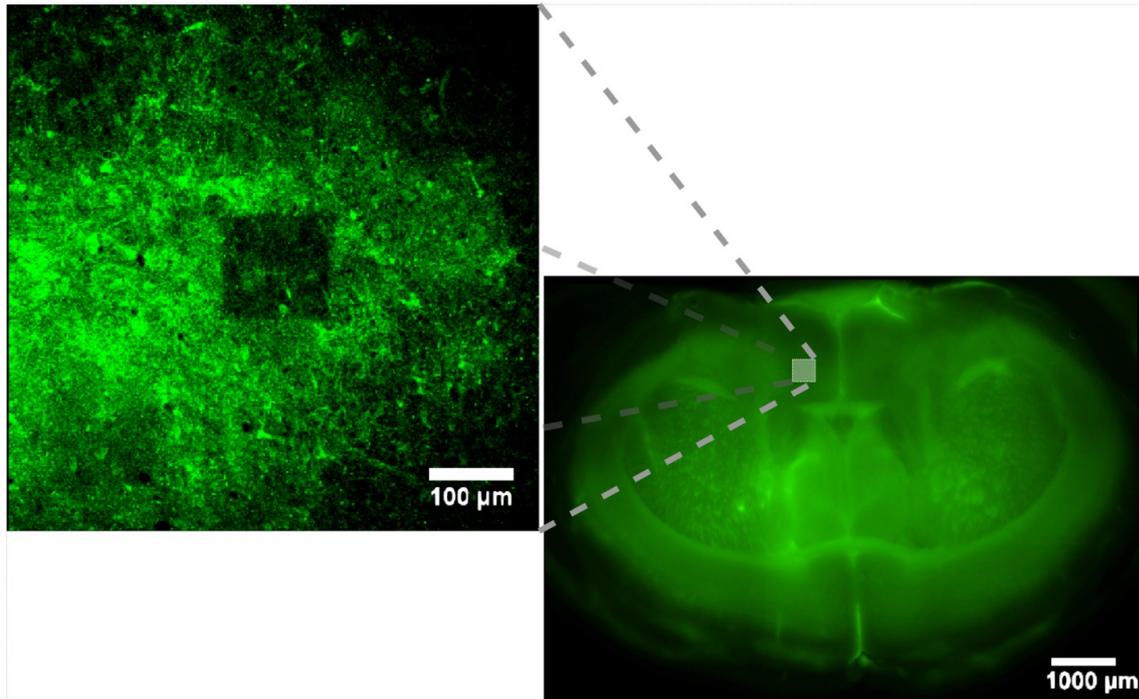


Рис. 1. Пример области с фотообесцвечиванием на образце среза головного мозга мыши (цвет онлайн)

Fig. 1. Example of a photobleached area in a murine brain slice (color online)

(рис. 1) производилась на протяжении 5 мин и начиналась сразу после завершения процесса фотообесцвечивания.

2. Результаты и их обсуждение

Измерение интенсивности флуоресценции в обесцвеченном участке производилось по полученным с временным интервалом 22.5 с наборам мультифотонных изображений в области с фотообесцвечиванием слоя образца. Для измерения значений интенсивности флуоресценции область с фотообесцвечиванием и окружающая её часть образца на мультифотонном изображении делилась на равные по линейным размерам квадратные поля со стороной 41.6 мкм; использовались средние значения яркости пикселей в данных полях.

Как следует из результатов измерений, интенсивность флуоресценции в области с фотообесцвечиванием восстанавливалась со временем, при этом интенсивность в прилегающих участках с течением времени уменьшалась. Данному процессу соответствовали средние значения интенсивности флуоресценции, которые увеличивались внутри области с фотообесцвечиванием (рис. 2, inner area) и уменьшались вдоль её внешней границы с течением времени (рис. 2, outer area).

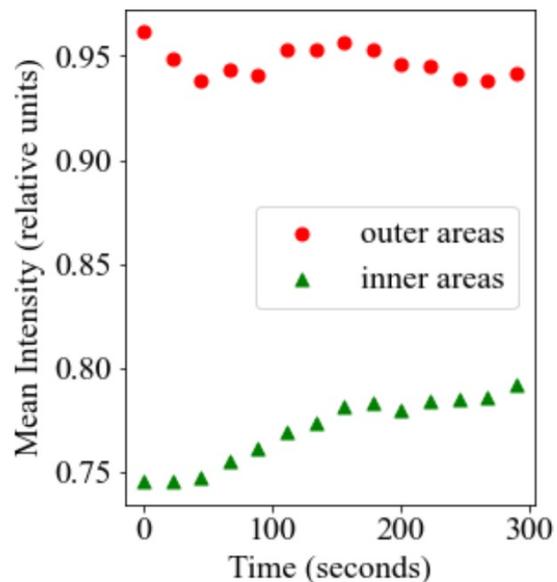


Рис. 2. Изменение среднего значения интенсивности флуоресценции в области с фотообесцвечиванием и вдоль её внешней границы с течением времени: «кружки» – внешняя граница, «треугольники» – внутренняя область (цвет онлайн)

Fig. 2. Change in the average fluorescence intensity in the photobleached area and along its boundary over time: «circles» are the outer border, «triangles» are the inner area (color online)

Для наглядности процесса восстановления флуоресценции на рис. 3 представлена мульти-

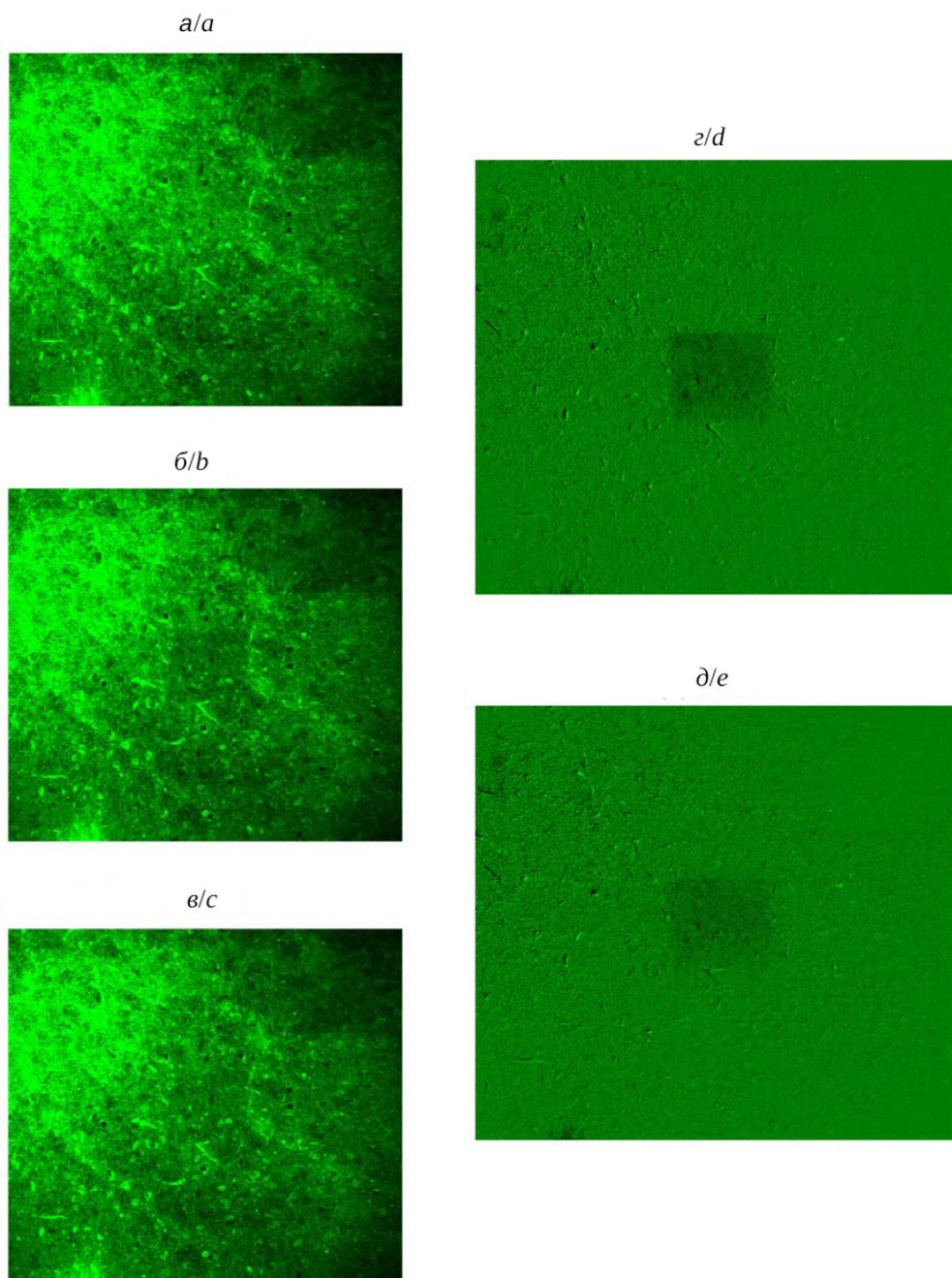


Рис. 3. Восстановление флуоресценции после фотообесцвечивания (для слоя образца): *a* – изображение до фотообесцвечивания, *б* – изображение сразу после фотообесцвечивания, *в* – изображение через 290 с после фотообесцвечивания, *г* – изображение, полученное вычитанием яркостей пикселей изображения *a* из яркостей пикселей изображения *б*, *д* – изображение, полученное вычитанием яркостей пикселей изображения *a* из яркостей пикселей изображения *в* (цвет онлайн)

Fig. 3. Fluorescence recovery after photobleaching (for a sample layer): *a* – image before photobleaching, *b* – image immediately after photobleaching, *c* – image 290 s after photobleaching, *d* – image obtained by subtracting the pixel intensities of image *a* from the pixel intensities of image *b*, *e* – image obtained by subtracting the pixel intensities of image *a* from the pixel intensities of image *c* (color online)

фотонная визуализация слоя образца за период 290 с после фотообесцвечивания (рис. 3, а, б, в) и разностные изображения для процесса восстановления после фотообесцвечивания (рис. 3, г, д).

Полученные данные по восстановлению флуоресценции с течением времени позволили рассчитать коэффициент диффузии для различных по пространственному положению областей в об-



разце с помощью математической аппроксимации, использованной в работе [19].

Расчёт коэффициента диффузии опирался на упрощённое представление процесса. Средние значения интенсивности флуоресценции в относительных единицах (яркость пикселя на мультифотонном изображении) по каждому квадратному полю внутри и вблизи области с фотообесцвечиванием, в которой происходит восстановление флуоресценции, для каждой временной точки, нормировались с помощью значения средней интенсивности для квадратных полей с соответствующим положением в слое образца в момент до проведения процесса фотообесцвечивания. Нормированные значения интенсивностей из квадратных полей вычислялись по формуле [19]:

$$\frac{I(t)}{I_0} = 1 - be^{-kt}, \quad (1)$$

где I – интенсивность; t – время; I_0 – интенсивность до фотообесцвечивания; b – параметр фотообесцвечивания; k – коэффициент скорости обмена молекул. Коэффициент диффузии рассчитывался по формуле, использующей коэффициент скорости обмена молекул k [19]:

$$D = \frac{\gamma w^2}{4 \ln 2} k, \quad (2)$$

где D – коэффициент диффузии; $\gamma \approx 0.88$ – параметр [19]; w – радиус лазерного пучка, в данном случае рассматривается как параметр половины линейного размера области с фотообесцвечиванием, принимающий значение 62.46 мкм.

Рассчитанные значения коэффициента диффузии при сопоставлении с координатами областей в образце, использованных для их расчёта, позволяют получить двухмерную карту диффузии в слое образца (табл. 1). Значения коэффициентов диффузии из табл. 1 сопоставимы по порядку величины с аналогичными величинами, приведёнными в работе [20].

Было отмечено, что для разных полей в слое образца коэффициенты диффузии (ми. табл. 1) и разности между начальным и конечным значением относительной яркости флуоресценции (табл. 2) отражают различный характер протекания процессов диффузии и восстановления интенсивности флуоресценции с течением времени в них. Отрицательные значения коэффициента диффузии в полях *вдоль внешней границы области* (см. табл. 1, с пометкой «вне») с фотообесцвечиванием и положительные значения в полях в самой области (см. табл. 1, с пометкой «внутри») указывают на направление диффузии флуоресцентных молекул.

Диффузии, направленной на восстановление флуоресценции в области с фотообесцвечиванием, соответствуют положительные значения коэффициентов диффузии, а диффузии, связанной с уменьшением интенсивности флуоресценции в квадратных полях вдоль границы области с фотообесцвечиванием – отрицательные значения коэффициентов диффузии (табл. 1). Значения разности между начальным и конечным значением относительной яркости флуоресценции приобретали положительный или отрицательный знак по аналогичному принципу (табл. 2). В ходе процесса диффузии часть фотообесцвеченных флу-

Таблица 1 / Table 1

Коэффициенты диффузии (мкм²/с) в квадратных полях области с фотообесцвечиванием слоя образца и вдоль её границы

Diffusion coefficients (μm²/s) in square areas of the photobleached region of the sample layer and along its boundaries

По оси Y, мкм / Y-axis, μm	По оси X, мкм / X-axis, μm				
	Вне / Outside -83.28	Внутри / Inside -41.64	Внутри / Inside 0	Внутри / Inside 41.64	Вне / Outside 83.28
Вне / Outside -83.28	-1.41 ± 0.80	-1.10 ± 0.52	-1.05 ± 0.50	-0.84 ± 0.51	-2.72 ± 1.01
Внутри / Inside 41.64	-1.05 ± 0.40	0.94 ± 0.11	0.91 ± 0.07	0.87 ± 0.08	-0.20 ± 0.38
Внутри / Inside 0	-0.66 ± 0.41	0.88 ± 0.08	0.75 ± 0.06	0.97 ± 0.06	-0.24 ± 0.30
Внутри / Inside 41.64	-0.80 ± 0.59	1.28 ± 0.13	0.86 ± 0.08	0.97 ± 0.08	-0.07 ± 0.40
Вне / Outside 83.28	-0.5 ± 0.96	-0.76 ± 0.53	-0.89 ± 0.77	-0.54 ± 0.56	-0.52 ± 0.84



Таблица 2 / Table 2

Разность яркости (относительные единицы) в квадратных полях области с фотообесцвечиванием и вдоль её границы между начальным моментом времени и моментом времени 290 секунд
Brightness difference (relative units) in square areas of the photobleached region and along its boundaries between 0 and 290 seconds time points

Ось Y, мкм / Y-axis, μm	Ось X, мкм / X-axis, μm				
	Вне / Outside -83.28	Внутри / Inside -41.64	Внутри / Inside 0	Внутри / Inside 41.64	Вне / Outside 83.28
Вне / Outside -83.28	-0.025	-0.019	-0.037	-0.022	-0.019
Внутри / Inside 41.64	-0.022	0.047	0.054	0.047	-0.021
Внутри / Inside 0	-0.026	0.049	0.038	0.060	-0.013
Внутри / Inside 41.64	-0.022	0.052	0.025	0.036	-0.018
Вне / Outside 83.28	-0.023	-0.025	-0.029	-0.024	-0.016

оресцентных молекул перемещается за пределы области, а некоторое количество флуоресцентных молекул без фотообесцвечивания перемещается в данную область.

Заключение

Диффузия флуоресцентного красителя происходит в плоскости слоёв образца, поскольку сам образец головного мозга не пропитывается насквозь красителем за 15 мин, и во время визуализации восстановления флуоресценции в образец не вводится новый объём красителя; при этом фотообесцвечивание в образце проводится послойно. Диффузия в ортогональном к слоям образца направлении не происходит в значимом для данного случая объёме.

Полученный набор коэффициентов диффузии (см. табл. 1) показывает перемещение фотообесцвеченных молекул из самой области в прилегающие к её границам квадратные поля, обратный процесс для молекул без фотообесцвечивания, а также анизотропию в самом процессе диффузии молекул: в квадратных полях в правой нижней части области (относительно координат мультифотонного изображения) процесс диффузии идёт быстрее, чем в квадратных полях, расположенных ближе к левому верхнему углу области.

Таким образом, показано, что сочетание метода восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания с мультифотонной микроскопией позволяет визуализировать карту диффузии молекул в тканях головного мозга белой лабораторной мыши с течением времени. Полученные данные

указывают на наличие анизотропии в восстановлении флуоресценции. Анизотропные свойства перемещения молекул могут быть связаны со структурой межклеточного пространства и сосудистых систем головного мозга.

Полученные данные не дают полноценного представления о диффузии в тканях мозга, поскольку исследование было проведено *ex vivo*, наблюдаемые свойства и процессы отличались от тех, что могут происходить в живой ткани, однако результаты данной работы служат основой для создания методики исследования диффузии *in vivo* в тканях головного мозга. Результаты данного исследования могут найти применение в дальнейших исследовательских работах в области молекулярной диффузией и структуры головного мозга.

Список литературы / References

1. Blokhina I., Terskov A., Evsiukova A., Dubrovsky A., Adushkina V., Zlatogorskaya D., Dmitrenko A., Tuzhilkin M., Manzhaeva M., Krupnova V., Ilyukov E., Myagkov D., Tuktarov D., Popov S., Tzoy M., Shirokov A., Fedosov I., Semyachkina-Glushkovskaya O. Photodynamic opening of the blood-brain barrier affects meningeal lymphatics and the brain's drainage in healthy male mice. *Biomedical Optics Express*, 2024, vol. 15, iss. 10, pp. 6063–6072. <https://doi.org/10.1364/BOE.527892>
2. Du D., Fu W., Su S., Mao X., Yang L., Xu M., Yuan Y., Gao Y., Geng Z., Chen Y., Zhao M., Fu Y., Yin F., Han H. Remote regulation of molecular diffusion in extracellular space of Parkinson's disease rat model by subthalamic nucleus deep brain stimulation. *Cyborg and Bionic Systems*, 2025, vol. 6, art. 0218. <https://doi.org/10.34133/cbsystems.0218>



3. Mizuta K., Sato M. Multiphoton imaging of hippocampal neural circuits: Techniques and biological insights into region-, cell-type-, and pathway-specific functions. *Neurophotonics*, 2024, vol. 11, iss. 3, art. 033406. <https://doi.org/10.1117/1.Nph.11.3.033406>
4. Yong Y., Cai Y., Lin J., Ma L., Han H., Li F. Advancement in modulation of brain extracellular space and unlocking its potential for intervention of neurological diseases. *Med-X*, 2024, vol. 2, art. 6. <https://doi.org/10.1007/s44258-024-00021-7>
5. McCarty G., Dunaway L., Denison J., Sombers L. Neurotransmitter Readily Escapes Detection at the Opposing Microelectrode Surface in Typical Amperometric Measurements of Exocytosis at Single Cells. *Analytical Chemistry*, 2022, vol. 94, iss. 27, pp. 9548–9556. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.2c00060>
6. Chen J., Li Z., Han Z., Kang D., Ma J., Yi Y., Fu F., Guo W., Zheng L., Xi G., He J., Qiu L., Li L., Zhang Q., Wang C., Chen J. Prognostic value of tumor necrosis based on the evaluation of frequency in invasive breast cancer. *BMC Cancer*, 2023, vol. 23, art. 530. <https://doi.org/10.1186/s12885-023-10943-x>
7. Lacin M., Yildirim M. Applications of multiphoton microscopy in imaging cerebral and retinal organoids. *Frontiers in Neuroscience*, 2024, vol. 18, art. 1360482. <https://doi.org/10.3389/fnins.2024.1360482>
8. Ye M., Yu X., Yuan Y., He M., Xiong S., Li J., Wang Y., Li C., Xiong X., Deng H. Design a dual-response two-photon fluorescent probe for simultaneous imaging of mitochondrial viscosity and peroxynitrite in a thrombosis model. *Analytica Chimica Acta*, 2024, vol. 1287, art. 342088. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.342088>
9. Safae M., Nishitani S., McFarlane I., Yang S., Sun E., Medina S., Squire H., Landry M. Dual infrared 2-photon microscopy achieves minimal background deep imaging in brain and plant tissues. *Advanced Functional Materials*, 2024, vol. 34, iss. 44, art. 2404709. <https://doi.org/10.1002/adfm.202404709>
10. Day C., Kang M. The utility of fluorescence recovery after photobleaching (FRAP) to study the plasma membrane. *Membranes*, 2023, vol. 13, iss. 5, art. 492. <https://doi.org/10.3390/membranes13050492>
11. Parlow J., Rodler A., Gråsjö J., Sjögren H., Hansson P. FRAP analysis of peptide diffusion in extracellular matrix mimetic hydrogels as an in vitro model for subcutaneous injection. *International Journal of Pharmaceutics*, 2024, vol. 664, art. 124628. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2024.124628>
12. Kenworthy A. What's past is prologue: FRAP keeps delivering 50 years later. *Biophysical Journal*, 2023, vol. 122, iss. 18, pp. 3577–3586. <https://doi.org/10.1016/j.bpj.2023.05.016>
13. Parlow J., Rodler A., Gråsjö J., Sjögren H., Hansson P. FRAP analysis of peptide diffusion in extracellular matrix mimetic hydrogels as an in vitro model for subcutaneous injection. *International Journal of Pharmaceutics*, 2024, vol. 664, art. 124628. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2024.124628>
14. Hashlamoun K., Abusara Z., Ramírez-Torres A., Grillo A., Herzog W., Federico S. Fluorescence recovery after photobleaching: direct measurement of diffusion anisotropy. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 2020, vol. 19, pp. 2397–2412. <https://doi.org/10.1007/s10237-020-01346-z>
15. Li M., Razumtcev A., Turner G., Hwang Y., Simpson G. Fast Diffusion Characterization by Multiphoton Excited Fluorescence Recovery while Photobleaching. *Analytical Chemistry*, 2023, vol. 95, iss. 38, pp. 14331–14340. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c02638>
16. Elias T. M., Brown Jr. E. B., Brown III E. B. Expanding the applicability of multiphoton fluorescence recovery after photobleaching by incorporating shear stress in laminar flow. *Journal of Biomedical Optics*, 2023, vol. 28, iss. 7, art. 076502. <https://doi.org/10.1117/1.JBO.28.7.076502>
17. George S., Steele C., Ricci A. A two-photon FRAP protocol to measure the stereociliary membrane diffusivity in rat cochlear hair cells. *STAR Protocols*, 2021, vol. 2, iss. 3, art. 100637. <https://doi.org/10.1016/j.xpro.2021.100637>
18. Xu X., Ge X., Xiong H., Qin Z. Toward dynamic, anisotropic, high-resolution and functional measurement in the brain extracellular space. *Neurophotonics*, 2022, vol. 9, iss. 3, art. 032210. <https://doi.org/10.1117/1.Nph.9.3.032210>
19. Saito T., Deguchi S. Advancing FRAP for cell studies: Where there is a new method, there is a new field. *Journal of Biomechanical Science and Engineering*, 2023, vol. 18, no. 4, art. 23-00028. <https://doi.org/10.1299/jbse.23-00028>
20. Syková E., Nicholson C. Diffusion in brain extracellular space. *Physiological Reviews*, 2008, vol. 88, iss. 4, pp. 1277–1340. <https://doi.org/10.1152/physrev.00027.2007>

Поступила в редакцию 18.09.2025; одобрена после рецензирования 30.11.2025; принята к публикации 19.12.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 18.09.2025; approved after reviewing 30.11.2025; accepted for publication 19.12.2025; published 31.03.2026



ТВЕРДОТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОНИКА, МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 53–61
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 53–61
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-53-61>, EDN: KMNROY

Научная статья
УДК 530.145.81

Повышение эффективности метода SCC DFTB в описании межатомных взаимодействий и предсказании электронных свойств

О. Е. Глухова^{1,2✉}, П. А. Колесниченко¹

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

²Первый государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Россия, г. Москва, ул. Большая Пироговская, д. 2, стр. 4

Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, ¹заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики Института физики; ²ведущий научный сотрудник лаборатории биомедицинских нанотехнологий Института физики, glukhovaoe@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028

Колесниченко Павел Андреевич, аспирант, ассистент кафедры радиотехники и электродинамики Института физики, kolesnichenkopa@list.ru, <https://orcid.org/0009-0009-9158-0795>, AuthorID: 1284338

Аннотация. Тонкие плёнки оксида меди – один из наиболее эффективных материалов для газовых датчиков. Расширение сенсорных возможностей этого материала требует предсказательного моделирования. В данной работе для обеспечения физически корректного описания взаимодействия поверхности плёнки Cu_2O с аналитами и её хеморезистивного отклика была осуществлена модификация параметризации для пар атомов Cu, O, C, H в рамках метода SCC DFTB (O-, C-, H- атомы входят в состав детектируемых молекул спиртов и воды). Созданный набор базисных функций демонстрирует более точное воспроизведение метрических параметров кристаллической решетки (длин межатомных связей и длин векторов трансляций) на основании сравнения с метрическими и электропроводными данными экспериментальных исследований.

Ключевые слова: SCC DFTB, Cu_2O , электронный транспорт, параметры Слэйтера–Костера

Для цитирования: Глухова О. Е., Колесниченко П. А. Повышение эффективности метода SCC DFTB в описании межатомных взаимодействий и предсказании электронных свойств // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 53–61. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-53-61>, EDN: KMNROY

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

Article

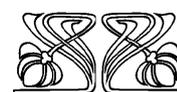
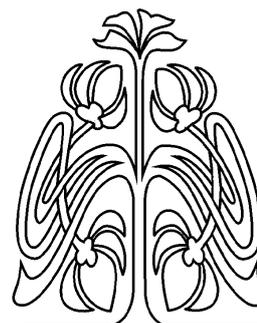
Improving the efficiency of the SCC DFTB method in describing interatomic interactions and predicting electronic properties

О. Е. Glukhova^{1,2✉}, П. А. Kolesnichenko¹

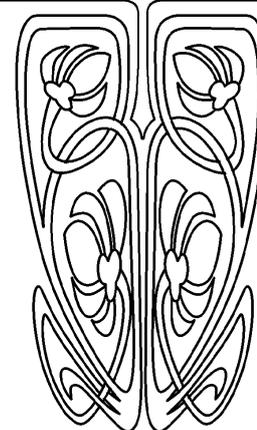
¹Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

²I. M. Sechenov First Moscow State Medical University, 2-4 Bolshaya Pirogovskaya St., Moscow 119991, Russia

© Глухова О. Е., Колесниченко П. А., 2026



**НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ**





Olga E. Glukhova, glukhovaoe@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028

Pavel A. Kolesnichenko, kolesnichenkopa@list.ru, <https://orcid.org/0009-0009-9158-0795>, AuthorID: 1284338

Abstract. Background and Objectives: Thin films of copper oxide are one of the most effective materials for gas sensors. Expanding the sensor capabilities of this material requires predictive modeling. In this work, to provide a physically correct description of the interaction of the Cu_2O film surface with analytes and its chemoresistive response, a modification of the parameterization for pairs of Cu, O, C, H atoms were carried out within the SCC DFTB method (O-, C-, H- atoms are part of the detected alcohol and water molecules). The created parameters set of functions demonstrates: more accurate reproduction of the metric parameters of the crystal lattice (lengths of interatomic bonds and lengths of translation vectors) – based on a comparison with metric and electrical conductivity data from experimental studies. **Materials and Methods:** The Tango software package was used to create the repulsive part of the parameter set, and the atomistic modeling was carried out using the DFTB SCC method in the DFTB+ software model. **Results:** A comparison has been made for eleven different supercells of Cu–C, Cu–O, Cu–H and Cu–Cu atom pairs. As a result, it has been shown that in all the studied cases, the improved parameterization gives a multiple smaller error relative to the DFT method, which was taken as a standard. For the Cu_2O supercell with a cubic crystal lattice, the DOS calculation has been performed, which has shown a band gap width of ~ 2 eV, which is close to the experimental value. The resistance has also been calculated, which differs from the experimentally determined value by no more than 10%. **Conclusion:** Thus, the parameters obtained in this work can be used to study electronic and electrophysical properties.

Keywords: SCC DFTB, Cu_2O , electron transport, Slater–Coster parameters

For citation: Glukhova O. E., Kolesnichenko P. A. Improving the efficiency of the SCC DFTB method in describing interatomic interactions and predicting electronic properties. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 53–61 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-53-61>, EDN: KMNROY

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

Введение

Важной задачей электроники и материаловедения по-прежнему является создание сенсорных устройств для обеспечения безопасности человека и улучшения качества его жизни. В связи с этим активно развивается направление, связанное с повышением эффективности устройств, детектирующих качество воздуха, – газовых сенсоров. Одним из распространенных и перспективных материалов для изготовления чувствительных элементов для таких устройств являются тонкие пленки – квази-2D-структуры на основе оксидов металлов [1–4]. Среди множества известных оксидов металлов особое место занимает оксид меди (Cu_2O), относящийся к полупроводниковым материалам с p-типом проводимости [5]. Такие материалы находят применение в фотогальванике, на их основе производятся солнечные батареи, гибридные диоды, биосенсоры, газовые сенсоры, транзисторы, литий-ионные батареи и автоэмиссионные катоды [3, 6–12].

Современные достижения в области вычислительной физики и химии способствуют развитию цифрового материаловедения, позволяя прогнозировать свойства новых материалов. Одним из наиболее эффективных методов моделирования атомных и электронных структур является метод теории функционала плотности (Density Functional Theory, DFT) [12–15], обеспечивающий высокую точность расчётов. Однако применение DFT ограничено из-за высоких требований к вычислительным ресурсам. В качестве альтернативы используется метод функционала плотности

с самосогласованием поля по заряду в приближении сильной связи (Self-Consistent Charge Density Functional Tight Binding, SCC DFTB). Метод сочетает высокую точность вычислений с высокой скоростью их реализации, что позволяет исследовать электронную структуру материалов с кристаллическими суперъячейками, содержащими несколько тысяч атомов, в электронный состав которых входят атомы с *s*-, *p*-, *d*- и *f*-электронами [16, 17]. В данной работе применялся метод SCC DFTB, реализованный в программном пакете «DFTB+» [18].

Ключевым инструментом метода SCC DFTB являются параметры Слейтера–Костера (СК-файлы или таблицы), описывающие взаимодействие между атомными орбиталями. Эти таблицы включают «электронную часть» – гамильтониан и «отталкивательную часть» – феноменологическое ядерное отталкивание.

Один из распространенных стандартных наборов СК-файлов matsci-0–3 [19] содержит параметры для описания взаимодействий типа Cu–Cu и Cu–O, но не содержит параметров для Cu–C и Cu–H. Как известно, O-, C-, H- атомы входят в состав молекул спиртов и воды, поэтому для расширения возможностей предсказательного моделирования сенсорных свойств оксидов меди необходимо развитие параметризации метода SCC DFTB. Поэтому в данной работе за основу были взяты существующие параметры из набора «РТПВ» (Periodic Table Baseline Parameter, Базовый параметр периодической таблицы) [20, 21], являющегося на данный момент самым крупным набором в открытой базе данных dftb.org [22],



описывающим взаимодействие большей части элементов таблицы Менделеева. В настоящей работе проведена модификация отталкивательной части, которая, как будет показано далее, обеспечивает верное строение кристаллической решетки и физически корректное строение зонной структуры. Модификация проведена с применением программного пакета «Tango» [23] с открытым исходным кодом. Предложен универсальный алгоритм для получения отталкивательной части СК-файлов для метода SCC DFTB. Новая параметризация призвана повысить качество вычисления хеморезистивного отклика пленки оксида меди на молекулы спиртов и воды.

Методы и подходы

Используемый квантовый метод SCC DFTB подробно описан в работе [24]. Полная энергия задается суммой энергии занятых состояний E_{band} , энергии взаимодействия электронов E_{sc} и энергии отталкивания атомных ядер E_{rep} . Недиагональные элементы гамильтониана описываются при помощи одноцентровых [25] и двухцентровых интегралов, вычисляемых с использованием правил преобразования Слейтера–Костера [25, 26]. Диагональные элементы гамильтониана определяются эффективным потенциалом, зависящим от энергии взаимодействия двух различных орбиталей, принадлежащих различным атомам, электронной плотностью и расстоянием между атомами. Отталкивательная часть СК-файлов определяется энергией E_{rep} , представляемой суммой парных потенциалов отталкивания между атомами с индексами i, j :

$$E_{rep} = \sum_{i < j} V_{rep_{i,j}}(r_{i,j}), \quad (1)$$

где потенциал отталкивания $V_{rep_{i,j}}$ задается суммой полиномиальных функций:

$$V_{rep}(r) = \sum_{p=2}^6 c_p (r_{cut} - r)^p. \quad (2)$$

Здесь радиус отсечки r_{cut} представляет собой расстояние между атомом и его ближайшим соседом, на котором энергия межатомного взаимодействия остаётся ненулевой. Коэффициенты c_p и степень p задают форму сплайна, определяющего свойства потенциала отталкивания. В данной работе поиск потенциала $V_{rep}(r)$ осуществлялся с использованием программы «Tango». Был разработан универсальный алгоритм поиска сплайнов для параметров СК-файлов, который представлен на рис. 1.

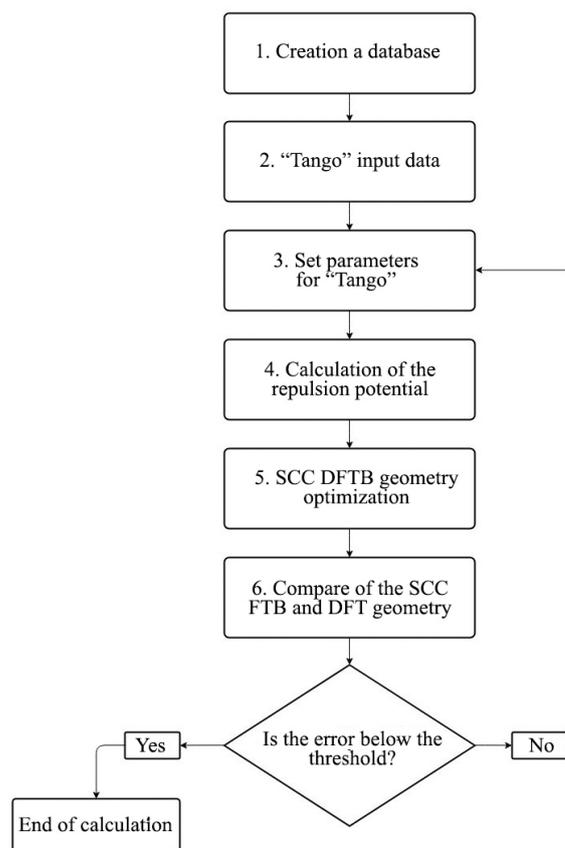


Рис. 1. Блок-схема получения набора параметров
Fig. 1. Block diagram of parameter set generation

Рассмотрим данную схему последовательно, по шагам.

Шаг 1. Создание базы данных: поочерёдная запись геометрических и энергетических параметров, полученных в результате одноточечных DFT расчётов при пошаговом изменении первоначальной геометрической конфигурации (сжатие, растяжение, скручивание и отрыв атома).

Шаг 2. Ввод данных для Tango: тип, конфигурация электронной оболочки, максимальный угловой момент, используемая база данных.

Шаг 3. Назначение минимального (r_{min}) и максимального (r_{cut}) расстояний между атомами, при котором определяется потенциал отталкивания.

Шаг 4. Расчёт потенциала отталкивания в программе Tango. Вычисленные потенциалы записываются в исходные СК-файлы из набора rtrb, содержащие «электронную часть».

Шаг 5. Оптимизация методом SCC DFTB атомных ячеек исследуемых структур с использованием полученных на предыдущем шаге потенциалов отталкивания пар атомов (и всего СК-набора в целом).



Шаг 6. На последнем этапе происходит сравнение оптимизированной методом SCC DFTB структуры из предыдущего шага с эталонной структурой, оптимизированной методом DFT. Сопоставляются длины векторов трансляции структур и длины межъядерных связей. Погрешность вычисляется в процентном отношении по каждой величине, после чего вычисляется общая погрешность для данной структуры.

Если величина полученной погрешности окажется ниже заданного значения, то расчёт окончен; в ином случае происходит возврат к шагу 3 с другими параметрами. Величина погрешности во всех подобных алгоритмах – порядка нескольких процентов. В данном случае погрешность составила 5%.

Для нахождения потенциала отталкивания Cu–O, Cu–Cu, Cu–C, Cu–H были использованы равновесные атомистические суперъячейки из базы данных next-gen.materialsproject.org [27] с различными типами кристаллических решёток. Суперъячейки были изотропно масштабированы в диапазоне объема от 99% до 131% с шагом в 1%, чтобы создать базу данных с различными величинами полной энергии и сил, действующих на каждый атом. Для каждого случая были выполнены одноатомные расчеты полной энергии с использованием DFT в пакете GPAW [28] с библиотекой ASE [29] и функционалом GGA-PBE, в приближении плоских волн (шаг 1 алгоритма). Разбиение зоны Бриллюэна методом Монхорст–Пака было выполнено с сеткой $16 \times 16 \times 16$ для кубических, триклинных и орторомбических ячеек и с сеткой $32 \times 16 \times 16$ – для гексагональных ячеек. Аналогичным образом была получена база данных для тех же структур с применением метода SCC DFTB, с такой же сеткой Монхорст–Пака для первой зоны Бриллюэна.

Оценка эффективности работы алгоритма проводилась путем сравнения геометрических параметров DFT и SCC DFTB-расчетов, проведенных в результате применения полученных СК-файлов с модифицированной «отталкивательной частью». А именно: для каждой пары атомов, принадлежащих разным структурам, но имеющих одинаковый номер, вычисляются разности соответствующих координат:

$$\Delta x = |x_1 - x_2|, \Delta y = |y_1 - y_2|, \Delta z = |z_1 - z_2| \quad (3)$$

(координаты (x_1, y_1, z_1) относятся к DFT-структуре, а координаты (x_2, y_2, z_2) – к SCC DFTB-структуре), а также суммарная разница на атом D_{diff} и опорное значение D_{ref} для эталонной DFT-

структуры:

$$D_{diff} = \Delta x + \Delta y + \Delta z, D_{ref} = |x_1| + |y_1| + |z_1|. \quad (4)$$

Выражения (3) и (4) использовались для каждого номера атома. Далее находилась средняя разница по всем атомам по формулам:

$$D_{diff_avr} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_{diff,i}, D_{ref_avr} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_{ref,i}, \quad (5)$$

где N – число атомов, i – индекс (номер) атома.

Итоговое относительное различие L вычислялось по формуле:

$$L = \left(\frac{D_{diff_avr}}{D_{ref_avr}} \right) \cdot 100\%. \quad (6)$$

Результаты и их обсуждение

Для разработки универсального алгоритма получения отталкивательной части СК-файлов в рамках метода SCC DFTB были выбраны ячейки различной конфигурации и, соответственно, различные группы пространственной симметрии (источник – мировая база данных Materials Project). Здесь и далее для удобства исследуемые ячейки будут обозначаться номерами из указанной базы данных.

Ячейки Cu–Cu. В табл. 1 приведены для ячеек кристаллов меди с различной пространственной симметрией численные показатели погрешности при сравнении параметров rt_{rb} и улучшенных параметров СК-файлов для атомов Cu–Cu, разработанных в данной работе. В первом столбце табл. 1 находятся индексы ячеек из открытой базы данных; во втором столбце указаны сингония суперъячейки и её группа симметрии. В третьем столбце дана погрешность координат атомов ячейки $L_{rt_{rb}}$, вычисленная по формуле (7) после оптимизации её геометрических параметров с целью минимизации полной энергии методом SCC DFTB с использованием параметров rt_{rb} относительно эталонной ячейки, оптимизация геометрических параметров которой проводилась методом DFT. В последнем четвертом столбце табл. 1 приведено значение L_{work} – величины, аналогичной $L_{rt_{rb}}$, но вычисленной с применением полученных в работе СК-файлов. Погрешность вычислений в рамках предложенной параметризации в 4 и 30 раз меньше для кубической и моноклинной структур соответственно. Для остальных структур погрешность также уменьшилась.



Таблица 1 / Table 1

Сравнение геометрических параметров суперъячеек атомов Cu–Cu
Comparison of geometric parameters of the Cu–Cu atom supercell

Ячейка / Cell	Симметрия ячейки / Cell symmetry	Погрешность / Error L_{ptrb} , %	Погрешность / Error L_{work} , %
mp-30	Cubic – $Fm\bar{3}m$	1.9	0.5
mp-989695	Hexagonal – $P6_3/mmc$	1.5	0.1
mp-1010136	Tetragonal – $I4/mmm$	9.8	8.8
mp-1059259	Monoclinic – $P12/m1$	30.5	1.2

На рис. 2 приведены виды ячеек для моноклинной сингонии, для которых разница в метрических параметрах значительна. Для исследуемой структуры электронные параметры $ptrb$ после оптимизации метрических параметров ячейки группируют все атомы меди друг к другу, длины связей при этом становятся меньше эффективного радиуса атома меди. Хорошо видно, как чётко воспроизводится атомная структура при использовании предлагаемого набора параметров для оптимизации. Здесь и далее синим цветом показана эталонная структура DFT, зелёным – оптимизированная параметрами $ptrb$, красным – улучшенными параметрами, созданными в данной работе.

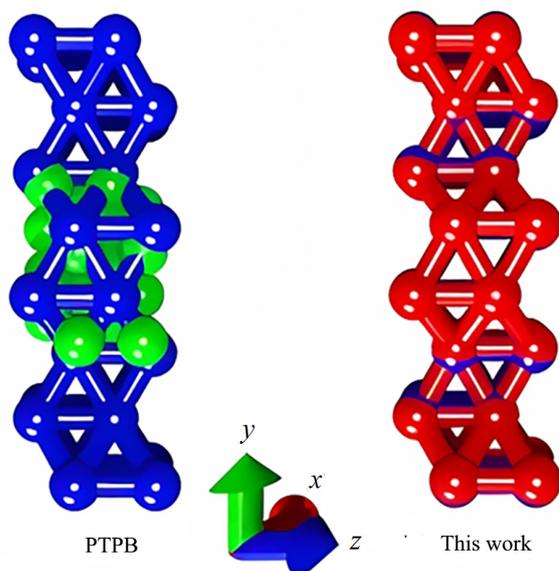


Рис. 2. Сравнение кристаллических решёток ячейки mp-1059259 (цвет онлайн)

Fig. 2. Comparison of crystal lattices of cell mp-1059259 (color online)

Ячейка Cu–C. Для Cu–C была выбрана единственная находящаяся в открытой базе данных элементарная ячейка кристалла с номером mp-1213653 [30] с орторомбической кристаллической решёткой $Cmmm$. На рис. 3 показано сравнение

положения атомов в элементе кристалла путём наложения друг на друга структур, оптимизированных DFT и SCC DFTB методами (с предлагаемым СК-файлом). Параметризация $ptrb$ в данном случае при поиске минимума энергии «разрушает» кристаллическую структуру, нарушаются все связи между атомами Cu и C, теряется периодичность. Улучшения СК-файлов, предлагаемые в данной работе, показывают корректное отображение кристаллической решётки, с сохранением длин связей и трансляционной симметрии кристалла. Сравнение геометрических параметров показывает, что параметры, полученные в данной работе, имеют погрешность всего лишь 5.2% по сравнению с набором $ptrb$ – 24.1%. Таким образом, удалось улучшить результат поиска равновесной конфигурации более чем в 4.5 раза.

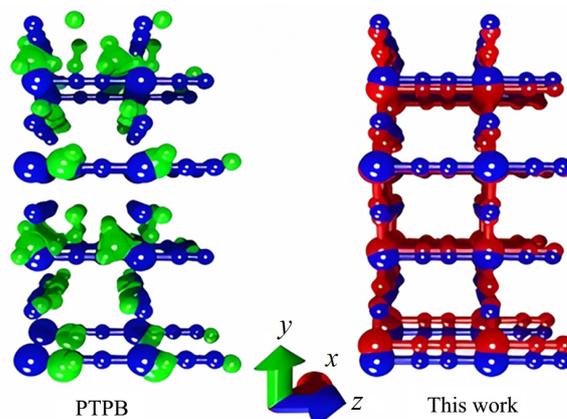


Рис. 3. Сравнение кристаллических решёток ячейки mp-1213653 (цвет онлайн)

Fig. 3. Comparison of crystal lattices of cell mp-1213653 (color online)

Ячейка Cu–O. Был выбран оксид меди с кубической кристаллической решёткой – полупроводник с запрещённой зоной ~ 2.17 эВ [31, 32], являющийся одним из самых перспективных материалов в качестве детектирующего элемента в газовой сенсорике. Равновесная элементарная ячейка кристалла была взята из открытой базы



данных next-gen.materialsproject.org с идентификационным номером mp-361 [33].

В табл. 2 сопоставляются погрешности поиска соответствующей минимальной энергии геометрии суперъячеек пар атомов Cu–O. Из приведённых данных видно, что для суперъячеек mp-1478 и mp-1692 удалось уменьшить погрешность в 6 и 7 раз соответственно, что показывает значительное преимущество полученного СК-набора параметров по сравнению с рtpb.

На рис. 4 представлены виды ячеек, полученные двумя разными наборами параметров. В частности, показаны ячейки mp-1478 и mp-1692, для которых разница в значениях L_{ptpb} и L_{work} максимальна. Как видно из рис. 4, а в результате оптимизации параметрами рtpb ячейка разрушилась, в то время как с другим набором ячейка сформировалась физически корректно. Аналогичная ситуация и с другой ячейкой (рис. 4, б): набор рtpb не справился с задачей поиска минимума энергии при изменении положений атомов в кристаллической решётке. В данном случае ячейка «сжалась», сильно отличаясь от эталонной DFT ячейки. Подобного не наблюдается при использовании улучшенных в данной работе параметров СК-файлов.

Ячейка Cu–H. Для кристаллов Cu–H были выбраны две ячейки, находящиеся в базе данных: mp-1225705 [34] с тригональной кристаллической решёткой и группой симметрии $R\bar{3}m1$, а также mp-24093 [34] с гексагональной кристаллической решёткой и группой симметрии $R6_3mc$. Значения L_{ptpb} и L_{work} составили 42.0 и 4.3% для гексагональной, 19.6 и 0.5% для тригональной.

На рис. 5 показаны виды ячеек, полученных в результате оптимизации двумя наборами СК файлов. Можно заметить, что набор рtpb не отражает кристаллическую структуру вещества, нарушаются длины связей атомов в кристалле и их положение. При этом улучшенный набор, как и во всех предыдущих случаях, корректно отражает метрические параметры ячейки и близко совпадает с эталонной DFT ячейкой.

Как было указано во введении, оксид меди Cu_2O – полупроводник *p*-типа, он является одним из материалов, широко применяемых для изготовления газовых сенсоров, поскольку его проводимость при адсорбции аналитов резко меняется. В данной работе с помощью полученных СК-файлов методом SCC DFTB исследована электронная проводимость пленки этого полупроводника. В качестве объекта исследования была выбрана ячейка Cu_2O mp-361 с кубической кристалли-

Таблица 2 / Table 2

Сравнение геометрических параметров суперъячеек атомов Cu–O
Comparison of geometric parameters of Cu–O atom supercells

Ячейка / Cell	Симметрия ячейки / Cell symmetry	Погрешность / Error L_{ptpb} , %	Погрешность / Error L_{work} , %
mp-361	Cubic – $Pn\bar{3}m1$	3.9	0.8
mp-760432	Orthorhombic – Fdd2	4.0	1.0
mp-1478	Tetragonal – $I4_1/amd$	30.9	5.3
mp-1692	Tetragonal – $P4_2/mmc$	23.4	3.1

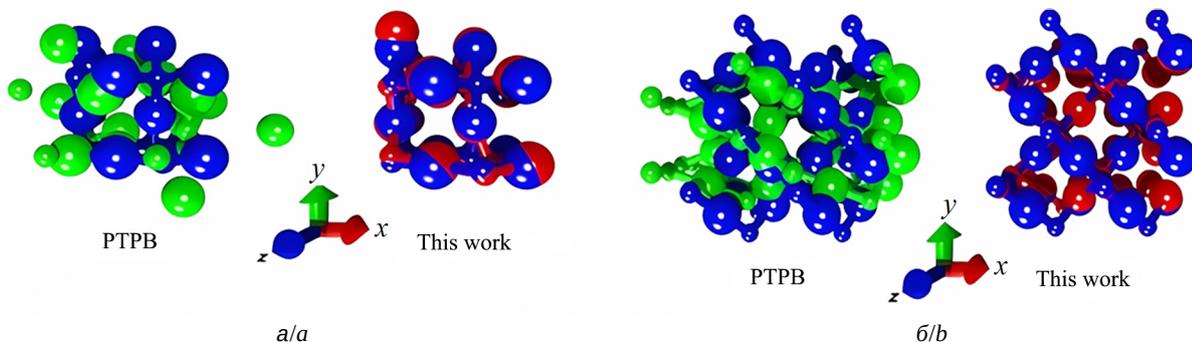


Рис. 4. Сравнение кристаллических решёток: а – ячейки mp-1478; б – ячейки mp-1692 (синим цветом показана эталонная структура DFT, зелёным – оптимизированная параметрами рtpb, красным – улучшенными параметрами) (цвет онлайн)
Fig. 4. Comparison of crystal lattices: a – cell mp-1478; b – cell mp-1692 (blue shows the reference DFT structure, green shows the one optimized with ptpb parameters, red shows the one with improved parameters) (color online)

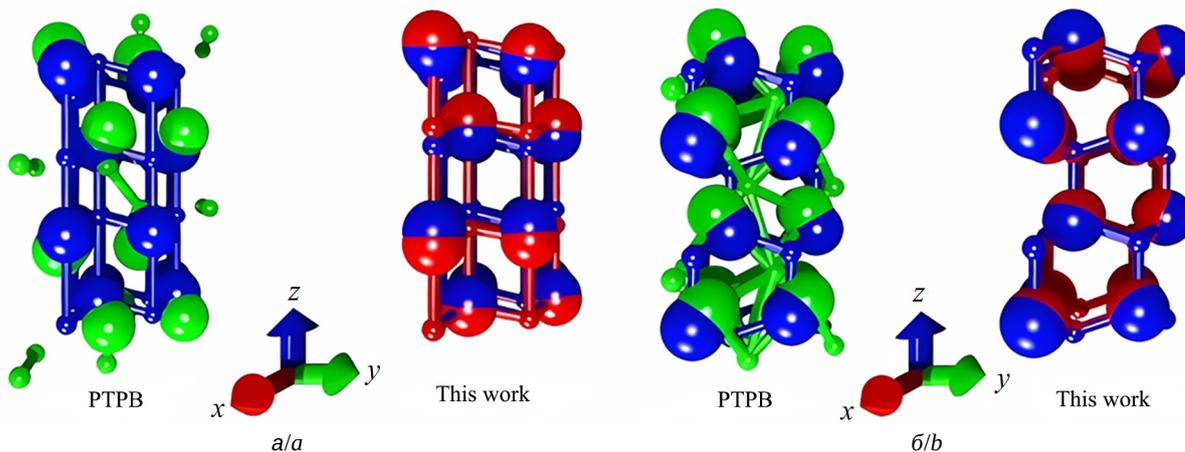


Рис. 5. Сравнение кристаллических решёток: а – ячейки mp-1225705; б – ячейка mp-24093 (синим цветом показана эталонная структура DFT, зелёным – оптимизированная параметрами ptpb, красным – улучшенными параметрами) (цвет онлайн)

Fig. 5. Comparison of crystal lattices: cell mp-1225705 (a); cell mp-24093 (b) (blue shows the reference DFT structure, green shows the one optimized with ptpb parameters, red shows the one with improved parameters) (color online)

ческой решёткой ввиду своих экспериментально установленных электронных свойств, широкой запрещённой зоны, равной порядка 2.17 эВ [31, 32], а также минимальной погрешности метрических параметров ячейки после SCC DFTB расчёта в сравнении с DFT подходом. Рассчитаны плотность состояний (DOS) для указанной структуры (рис. 6, а) и функция пропускания T (рис. 6, б). Красным цветом показан уровень Ферми, равный -1.4036 эВ. Для расчета функции пропускания

был применен формализм Ландауэра–Буттикера и метод неравновесных функций Грина.

Из графика плотности состояний можно увидеть, что ширина запрещённой зоны составляет ~ 2 эВ. Полученное значение отлично от экспериментального всего лишь на 7.83%. Этот результат подтверждает корректность и точность полученных в данной работе параметров СК-файлов. На основе функции пропускания рассчитаны проводимость и сопротивление: $2.044 \cdot 10^{-9}$ см

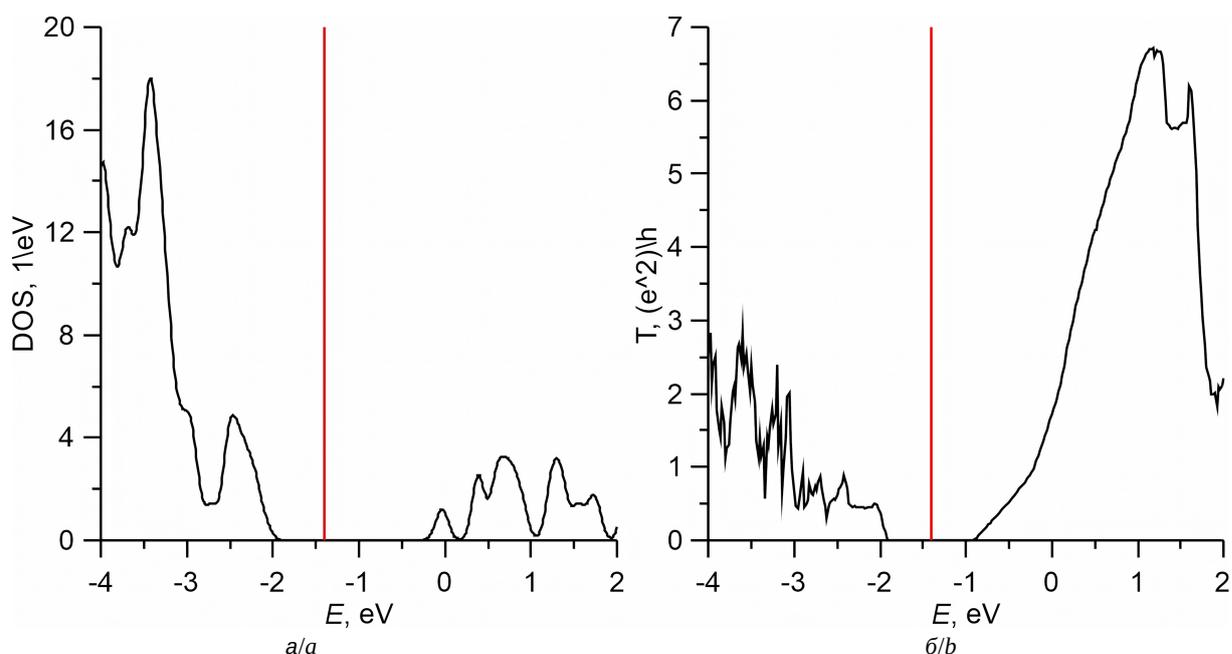


Рис. 6. Плотность энергетических состояний (DOS) (а), функция пропускания (б) для Cu_2O (цвет онлайн)

Fig. 6. Density Of States (DOS) (a), transmission function (b) for the Cu_2O (color online)



и $4.891 \cdot 10^8$ Ом соответственно. Величина сопротивления полностью согласуется с экспериментально выявленным значением равным порядка 10^8 Ом для низких температур (менее 100°C) [35, 36], что также подтверждает физическую корректность полученных параметров СК-файлов для расчета проводимости структур.

Заключение

В данной работе был существенно улучшен существующий набор prtb для пар атомов Cu–C, Cu–O, Cu–H, Cu–Cu путём изменения его оттачивательной части для этих комбинаций. Были получены СК-файлы, которые затем использовались для SCC DFTB расчётов поиска минимума энергии структуры при изменении метрических параметров кристалла. Было проведено сравнение для одиннадцати различных суперъёчек кристаллов CuC, CuO, CuH и Cu. Показано, что во всех исследованных случаях улучшенная параметризация даёт кратно меньшую погрешность относительно метода DFT, который принимался за эталон. Для суперъёчки Cu_2O с кубической кристаллической решёткой был осуществлён расчёт плотности энергетических состояний, который показал ширину запрещённой зоны ~ 2 эВ, что близко к экспериментальному значению. Было также вычислено сопротивление, которое отличается от экспериментально выявленного не более, чем на 10% [35, 36]. Таким образом, полученные в данной работе параметры могут быть использованы для исследования электронных и электрофизических свойств материалов на основе оксида меди и их взаимодействия с аналитами, что открывает возможности для точного предсказательного моделирования хеморезистивных газовых сенсоров.

Список литературы / References

1. Steinhauer S. Gas sensors based on copper oxide nanomaterials: A review. *Chemosensors*, 2021, vol. 9, iss. 3, art. 51. <https://doi.org/10.3390/chemosensors9030051>
2. Nunes D., Pimentel A., Gonçalves A., Pereira S., Branquinho R., Barquinha P., Fortunato E., Martins R. Metal oxide nanostructures for sensor applications. *Semicond. Sci. Technol.*, 2019, vol. 34, iss. 4, art. 43001. <https://doi.org/10.1088/1361-6641/ab011e>
3. Zhang Z., Zhang S., Liu S., Wang M., Fu G., He L., Yang Y., Fang S. Electrochemical aptasensor based on one-step synthesis of Cu_2O @aptamer nanospheres for sensitive thrombin detection. *Sens. Actuators B Chem.*, 2015, vol. 220, pp. 184–191. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.05.089>
4. Moseley P. T. Progress in the development of semiconducting metal oxide gas sensors: A review. *Meas. Sci. Technol.*, 2017, vol. 28, art. 082001. <https://doi.org/10.1088/1361-6501/aa7443>
5. Kim H. J., Lee J. H. Highly sensitive and selective gas sensors using p-type oxide semiconductors: Overview. *Sens. Actuators B Chem.*, 2014, vol. 192, pp. 607–627. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2013.11.005>
6. Zoolfakar A. S., Rani R. A., Morfa A. J., O'Mullane A. P., Kalantar-zadeh K. Nanostructured copper oxide semiconductors: A perspective on materials, synthesis methods and applications. *J. Mater. Chem. C*, 2014, vol. 2, pp. 5247–5270. <https://doi.org/10.1039/C4tc00345d>
7. Zhang Q., Zhang K., Xu D., Yang G., Huang H., Nie F., Liu C., Yang S. CuO nanostructures: Synthesis, characterization, growth mechanisms, fundamental properties, and applications. *Prog. Mater. Sci.*, 2014, vol. 60, pp. 208–337. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.09.003>
8. Vequizo J. J. M., Zhang C., Ichimura M. Fabrication of $\text{Cu}_2\text{O}/\text{Fe}-\text{O}$ heterojunction solar cells by electrodeposition. *Thin Solid Films*, 2015, vol. 597, pp. 83–87. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2015.11.034>
9. Izaki M., Saito T., Ohata T., Murata K., Fariza B. M., Sasano J., Shinagawa T., Watase S. Hybrid Cu_2O diode with orientation-controlled C_{60} polycrystal. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2012, vol. 4, iss. 7, pp. 3558–3565. <https://doi.org/10.1021/am3006093>
10. Hsu C.-L., Tsai J.-Y., Hsueh T.-J. Ethanol gas and humidity sensors of $\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$ composite nanowires based on a Cu through-silicon via approach. *Sens. Actuators B Chem.*, 2016, vol. 224, pp. 95–102. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.10.018>
11. Al-Jawhari H. A. A review of recent advances in transparent p-type Cu_2O -based thin film transistors. *Mater. Sci. Semicond. Process.*, 2015, vol. 40, pp. 241–252. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2015.06.063>
12. Valvo M., Rehnlund D., Lafont U., Hahlin M., Edström K., Nyholm L. The impact of size effects on the electrochemical behaviour of Cu_2O -coated Cu nanopillars for advanced Li-ion microbatteries. *J. Mater. Chem. A*, 2014, vol. 2, pp. 9574–9586. <https://doi.org/10.1039/C4TA01361A>
13. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, pp. 1758–1775. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
14. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Buongiorno Nardelli M., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Cococcioni M., Colonna N., Carnimeo I., Dal Corso A., de Gironcoli S., Delugas P., DiStasio R. A. Jr., Ferretti A., Floris A., Fratesi G., Fugallo G. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017, vol. 29, no. 46, art. 465901. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>
15. Soler J. M., Artacho E., Gale J. D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2002, vol. 14, pp. 2745–2779. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302>
16. Liu H., Seifert G., Di Valentin C. An efficient way to model complex magnetite: Assessment of SCC-DFTB



- against DFT. *J. Chem. Phys.*, 2019, vol. 150, art. 094703. <https://doi.org/10.1063/1.5085190>
17. Zheng G., Irle S., Morokuma K. Performance of the DFTB method in comparison to DFT and semiempirical methods for geometries and energies of C₂₀–C₆₀ fullerene isomers. *Chem. Phys. Lett.*, 2005, vol. 412, pp. 210–216. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.06.105>
 18. Manzhos S. Comparative density functional theory and density functional tight binding study of 2-anthropic acid on TiO₂. *Chem. Phys. Lett.*, 2016, vol. 643, pp. 16–20. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.11.007>
 19. Hourahine B., Aradi B., Blum V., Bonafé F., Buccheri A., Camacho C., Cevallos C., Deshayé M. Y., Dumitrică T., Dominguez A., Ehlert S., Elstner M., van der Heide T., Hermann J., Irle S., Kranz J. J., Köhler C., Kowalczyk T., Kubař T., Lee I. S. et al. DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations. *J. Chem. Phys.*, 2020, vol. 152, iss. 12, art. 124101. <https://doi.org/10.1063/1.5143190>
 20. Cui M., Reuter K., Margraf J. T. Obtaining Robust Density Functional Tight Binding Parameters for Solids Across the Periodic Table (Version 0.1) [Data set]. *Zenodo*. Available at: <https://zenodo.org/records/10677796> (accessed December 26, 2025). <https://doi.org/10.5281/zenodo.10677796>
 21. Cui M., Reuter K., Margraf J. T. Obtaining Robust Density Functional Tight Binding Parameters for Solids Across the Periodic Table. *J. Chem. Theory Comput.*, 2024, vol. 20, iss. 12, pp. 5276–5290. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c00228>
 22. DFTB. Available at: <https://dftb.org/parameters/> (accessed August 10, 2025)
 23. Van den Bossche M., Grönbeck H., Hammer B. Tight-binding approximation-enhanced global optimization. *J. Chem. Theory Comput.*, 2018, vol. 14, iss. 5, pp. 2797–2807. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00039>
 24. Koskinen P., Makinen V. Density-functional tight-binding for beginners. *Comput. Mater. Sci.*, 2009, vol. 47, iss. 1, pp. 237–253. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.07.013>
 25. Frauenheim T., Seifert G., Elstner M., Hajnal Z., Jungnickel G., Porezag D., Suhai S., Scholz R. A self-consistent charge density-functional based tight-binding method for predictive materials simulations in physics, chemistry and biology. *Phys. Status Solidi B*, 2000, vol. 217, pp. 41–62. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(200001\)217:1<3C41::AID-PSSB41>3E3.0.CO;2-V](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(200001)217:1<3C41::AID-PSSB41>3E3.0.CO;2-V)
 26. Slater J. C., Koster G. F. Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, 1954, vol. 94, no. 6, pp. 1498–1524. <https://doi.org/10.1103/physrev.94.1498>
 27. Jain A., Ong S. P., Hautier G., Chen W., Richards W. D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner D., Ceder G., Persson K. A. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Mater.*, 2013, vol. 1, iss. 1, art. 011002. <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
 28. Kjeldsen M. K., Enkovaara J., Rostgaard C., Olsen J., Thygesen K. S. Implementation of the projector augmented-wave method in the real-space grid-based electronic structure code GPAW. *Phys. Rev. B*, 2006, vol. 74, art. 235102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.235102>
 29. Larsen A. H., Mortensen J. J., Blomqvist J., Castelli I. E., Christensen R., Duřak M., Friis J., Groves M. N., Hammer B., Hargus C., Hermes E. D., Jennings P. C., Jensen P. B., Kermode J., Kitchin J. R., Kolsbjerg E. L., Kubal J., Kaasbjerg K., Lysgaard S., Maronsson J. B. et al. The Atomic Simulation Environment – A Python library for working with atoms. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017, vol. 29, iss. 27, art. 273002. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa680e>
 30. *Materials Project for CuC₆ (mp-1213653) from database version v2025.09.25*. Available: <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-1213653> (accessed December 26, 2025).
 31. Ribbing C. G., Roos A. Copper oxides (Cu₂O, CuO). In: Palik E. D., ed. *Handbook of Optical Constants of Solids: in 3 vols*. New York, Academic Press, 1998, vol. 3, pp. 875–882. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-055630-7.50054-7>
 32. Mei L.-P., Feng J.-J., Wu L., Chen J.-R., Shen L., Xie Y., Wang A.-J. A glassy carbon electrode modified with porous Cu₂O nanospheres on reduced graphene oxide support for simultaneous sensing of uric acid and dopamine with high selectivity over ascorbic acid. *Microchim. Acta*, 2016, vol. 183, pp. 2039–2046. <https://doi.org/10.1007/s00604-016-1845-0>
 33. *Materials Project for Cu₂O (mp-361) from database version v2025.09.25*. Available: <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-361> (accessed December 26, 2025). <https://doi.org/10.17188/1207131>
 34. *Materials Project for CuH (mp-24093) from database version v2025.06.09*. Available at: <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-24093> (accessed December 26, 2025). <https://doi.org/10.17188/1199906>
 35. Padyath R., Seth J., Babu S. V. Deposition of copper oxide films by reactive laser – Ablation of copper formate in an Rf oxygen plasma ambient. *Thin Solid Films*, 1994, vol. 239, pp. 8–15. [https://doi.org/10.1016/0040-6090\(94\)90101-5](https://doi.org/10.1016/0040-6090(94)90101-5)
 36. Li F. M., Waddingham R., Milne W. I., Flewitt A. J., Speakman S., Dutson J., Thwaites M. Low temperature (<100°C) deposited p-type cuprous oxide thin films: Importance of controlled oxygen and deposition energy. *Thin Solid Films*, 2011, vol. 520, pp. 1278–1284. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2011.04.192>

Поступила в редакцию 28.06.2025; одобрена после рецензирования 30.09.2025; принята к публикации 10.10.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 28.06.2025; approved after reviewing 30.09.2025; accepted for publication 10.10.2025; published 31.03.2026



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 62–71

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 62–71

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-62-71>, EDN: LNCIOR

Научная статья
УДК 537.311.322



Моделирование кинетики деградации проводимости в наноструктурированных низкоразмерных полупроводниковых слоях при длительном воздействии постоянного тока

Л. А. Кочкуров

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

Кочкуров Леонид Алексеевич, кандидат физико-математических наук, lkochkurov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3360-8878>, AuthorID: 645071

Аннотация. Представлена дискретная сетевая модель для исследования кинетики деградации омической проводимости в низкоразмерных наноструктурированных полупроводниковых слоях (на примере нанодисперсных слоёв In_2O_3) при длительном воздействии постоянного тока. Модель объясняет экспериментально наблюдаемый переход в диэлектрическое состояние через механизм захвата подвижных носителей дефектами-ловушками, приводящий к разрушению проводящих мостиков. В основе методологии лежит трёхмерная перколяционная система на кубической решётке размером $300 \times 300 \times 15$ узлов, реализующая перколяцию по связям с логнормальным распределением проводимостей рёбер. Начальное количество непрерывных проводящих путей между электродами соответствует экспериментальным данным и определяет критическую конфигурацию системы. Динамика деградации формализована через эволюцию проводимости рёбер, зависящую от локальной плотности тока, рассчитываемой решением системы уравнений Кирхгофа для узловых потенциалов. Результаты демонстрируют количественное согласие с экспериментальной кинетикой перехода «полупроводник–диэлектрик», устанавливая корреляцию между разрушением перколяционных кластеров и макроскопической деградацией проводимости.

Ключевые слова: кинетика деградации, наноструктурированные полупроводники, перколяционная модель, захват носителей, оксид индия

Благодарности: Автор выражает особую благодарность доктору физико-математических наук, профессору Зимнякову Дмитрию Александровичу за ценные советы и замечания, высказанные в процессе написания статьи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-22-00333, <https://rscf.ru/project/24-22-00333/>).

Для цитирования: Кочкуров Л. А. Моделирование кинетики деградации проводимости в наноструктурированных низкоразмерных полупроводниковых слоях при длительном воздействии постоянного тока // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 62–71. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-62-71>, EDN: LNCIOR

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

Article

Modelling of conduction degradation kinetics in nanostructured low-dimensional semiconductor layers under long-term DC exposure

L. A. Kochkurov

Yury Gagarin State Technical University of Saratov, 77 Polytechnicheskaya St., Saratov 410054, Russia

Leonid A. Kochkurov, lkochkurov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3360-8878>, AuthorID: 645071

Abstract. Background and Objectives: Percolation models are widely employed to analyze electrical transport in disordered systems, particularly near critical thresholds. While substantial research has focused on static percolation properties, the dynamic evolution of such networks under external stimuli, such as constant current, remains less explored. This paper addresses the kinetics of conductivity degradation in nanostructured low-dimensional semiconductor layers (exemplified by nanodispersed In_2O_3 layers) under prolonged DC exposure. A discrete three-dimensional percolation model is developed to simulate the irreversible transition from conducting to dielectric states, driven by carrier trapping at defect sites. **Materials and Methods:** The model implements bond percolation on a cubic lattice of size $300 \times 300 \times 15$ nodes, with lognormal distributed edge conductivities. The initial configuration ensures 32 continuous conducting paths between electrodes, matching experimental data. Kirchhoff's equations are solved numerically to compute node potentials and local current densities. Degradation dynamics are introduced via time-dependent edge conductance reduction, governed by carrier trapping kinetics proportional to local current density. **Results:** Simulations have revealed a two-stage degradation kinetics: an initial quasi-linear voltage increase followed by accelerated growth due to percolation path fragmentation. The model quantitatively reproduces experimental voltage-time characteristics, with deviations under



5% over most of the temporal range. The critical reduction in conducting bond density leads to catastrophic loss of connectivity, consistent with percolation threshold behavior. **Conclusion:** The results demonstrate the applicability of dynamic percolation models to describe non-equilibrium degradation processes in nanostructured semiconductors. The approach provides a foundation for predicting lifetime and reliability of devices based on dispersed semiconductor materials, relevant for sensor and transparent electronics applications. Further model refinements incorporating additional degradation mechanisms (e.g., local heating, electrochemical effects) are suggested for improved late-stage accuracy. **Keywords:** degradation kinetics, nanostructured semiconductors, percolation model, carrier trapping, indium oxide

Acknowledgments: The author expresses special thanks to Prof. Dmitry A. Zimnyakov for valuable advice and comments during the writing of the paper.

This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-22-00333, <https://rscf.ru/project/24-22-00333/>).

For citation: Kochukov L. A. Modelling of conduction degradation kinetics in nanostructured low-dimensional semiconductor layers under long-term DC exposure. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 62–71 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-62-71>, EDN: LNCIOR

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

Введение

Современные тенденции в микроэлектронике и оптоэлектронике демонстрируют устойчивый интерес к низкоразмерным наноструктурированным полупроводниковым системам [1–3]. Дисперсные слои на основе оксидов металлов, таких как In_2O_3 , ZnO и TiO_2 , являются важным классом материалов благодаря уникальным электронным и оптическим свойствам [4, 5]. Эти материалы широко применяются в сенсорных устройствах [6–8], прозрачной электронике [9, 10] и тонкоплёночных транзисторах [11, 12], где стабильность характеристик под длительной нагрузкой является критическим фактором надёжности.

Одной из ключевых проблем, ограничивающих широкое практическое применение таких систем, является нестабильность их электрофизических характеристик при длительной эксплуатации, особенно в режиме протекания постоянного тока [13–15]. Последние исследования в этой области выявили общую закономерность, заключающуюся в необратимом переходе из проводящего состояния в состояние, близкое к диэлектрическому. Подобный переход может происходить в результате длительного воздействия постоянного тока. Данное физическое явление связывается с постепенным истощением ансамбля подвижных носителей заряда вследствие их захвата глубокими ловушками [16–18]. Актуальность изучения кинетики этих процессов подчеркивается как фундаментальным интересом к физике переноса заряда в неупорядоченных дисперсных системах, так и прикладной необходимостью прогнозирования надёжности и долговечности устройств на их основе.

Уменьшение характерного размера L активного слоя резко увеличивает отношение площади поверхности к объёму ($\propto L^{-1}$), усиливая влияние поверхностных эффектов на электрофизические свойства¹. В реальных условиях поверхность полупроводника взаимодействует с окружающей средой, что приводит к образованию оксидных плёнок и адсорбции примесей (кислород, пары воды). Структурные дефекты и адсорбированные атомы формируют энергетические состояния у поверхности, выступающие в роли ловушек для носителей заряда. Захват носителей этими ловушками генерирует пространственный заряд и сильное локальное электрическое поле ($\sim 10^5$ В/см), проникающее в приповерхностный слой и существенно модифицирующее электрофизические характеристики: электропроводность, работу выхода, фотоэлектрические явления.

Преобладание ловушек определённого типа (донорных или акцепторных) определяет знак поверхностного заряда, который обычно совпадает со знаком основных носителей в объёме. Возникающий двойной заряженный слой создаёт потенциальный барьер U_s , приводящий к экспоненциальному уменьшению концентрации электронов у поверхности:

$$n_s \approx n_0 \exp\left(-\frac{U_s}{kT}\right), \quad (1)$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура [19]. При характерных значениях $U_s \sim 0.5$ – 0.7 эВ формируется обеднённый носителями высокоомный приповерхностный слой.

В наноструктурированных системах, таких как слои наночастиц In_2O_3 [20, 21], поверхностные эффекты становятся доминирующими. Для

¹См.: Бедный Б. И. Электронные ловушки на поверхности полупроводников // Соросовский образовательный журнал. 1998. Т. 7. С. 114–121.



частиц диаметром ~ 100 нм с концентрацией электронов более 10^{19} см $^{-3}$ перераспределение носителей между объёмом и поверхностью приводит к образованию нескомпенсированного заряда и потенциального барьера, аналогичного барьеру Шоттки [22]. Это обуславливает высокую чувствительность проводимости к состоянию поверхности.

Традиционные континуальные модели (диффузии-дрейфа, транспортные) демонстрируют ограниченную применимость, так как не учитывают дискретную природу переноса заряда в дисперсных средах с прыжковым механизмом проводимости. При длине свободного пробега носителей, сопоставимой с размером структурных неоднородностей, макроскопические свойства критически зависят от статистики и эволюции конечного числа проводящих мостиков между электродами.

Перколяционные подходы предоставляют адекватный инструментарий для анализа подобных систем, позволяя явно учитывать пространственное распределение проводящих фаз, разброс локальных проводимостей и топологию межчастичных контактов. Однако многие перколяционные модели описывают систему с неизменной во времени структурой проводящей сети и не учитывают микроскопические механизмы деградации, индуцированные током.

Целью данной работы является разработка комплексной модели кинетики деградации проводимости в наноструктурированных слоях In_2O_3 , сформированных капельным методом на подложках со встречно-штыревыми электродами, при длительном воздействии постоянного тока.

1. Математическая модель кинетики деградации проводимости в наноструктурированных полупроводниковых слоях

Моделирование кинетики деградации омической проводимости в низкоразмерных дисперсных полупроводниковых слоях, подверженных длительному воздействию постоянного тока, требует адекватного учёта их структурной неоднородности и дискретной природы переноса заряда. Перенос заряда осуществляется по конечному числу дискретных проводящих путей (мостиков) между электродами, подверженных постепенной деградации под действием тока, что приводит к наблюдаемому переходу системы из проводящего в непроводящее состояние. В качестве основы для анализа процесса

деградации проводимости выбрана трёхмерная дискретная сетевая модель, реализующая подход теории перколяции.

Модель построена на трёхмерной кубической решётке размером 300 узлов по оси Y , 300 узлов по оси Z и 15 узлов по оси X . Межэлектродное расстояние в экспериментальной системе соответствует размеру по оси X . Значительные размеры в плоскости YZ (300×300 узлов) обусловлены двумя факторами: обеспечением репрезентативности моделирования статистически неоднородной дисперсной среды для корректного усреднения свойств и гарантией достижения экспериментально наблюдаемого количества проводящих путей без искусственного завышения вероятности перколяции. Electroды представлены слоями узлов при $X = 1$ и $X = 15$. На электрод ($X = 1$) подаётся напряжение V_{app} , электрод ($X = 15$) заземляется ($\phi = 0$ В), создавая электрическое поле, направленное вдоль оси X , величина которого изменяется во времени вследствие деградации.

На рис. 1 показан фрагмент перколяционной сети ($15 \times 15 \times 15$ узлов), иллюстрирующий морфологию типичного проводящего кластера (чёрный цвет), формирующего сквозной мостик между электродами. Кластер характеризуется разветвлённой топологией с критическими «узкими местами», где разрыв связи приводит к разрушению пути. Серым цветом обозначены нефункциональные элементы: изолированные связи и фрагменты кластеров («мёртвые концы», локальные петли). Визуализация подчёркивает стохастичность формирования проводящих путей.

Каждый узел решётки случайно назначается проводящим (вероятность p) или изолирующим ($1 - p$), формируя двухфазную среду. Однако возможность протекания тока определяется проводимостями рёбер между соседними узлами, что соответствует модели перколяции по связям (bond percolation). Этот выбор физически обоснован для наноструктурированных слоёв, где проводимость между наночастицами (узлами) обуславливается свойствами межчастичных контактов (рёбер) [23–25]. Сопротивление этих контактов является лимитирующим фактором, определяющим скорость и характер деградации. Ребро между узлами l и m получает ненулевую проводимость g_{lm} только при условии, что оба узла проводящие. Для учёта неоднородности локальных свойств структуры, проводимость

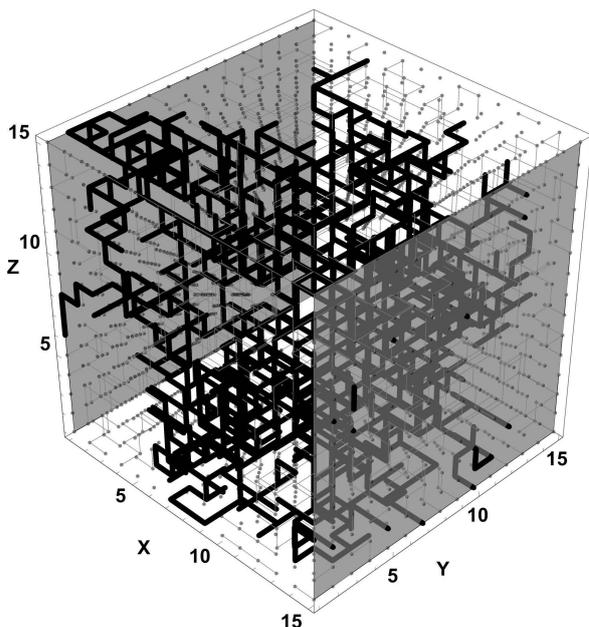


Рис. 1. Трёхмерная визуализация перколяционной сети ($15 \times 15 \times 15$ узлов): непрерывный кластер между противоположными гранями (цвет – чёрный), изолированные связи и фрагменты (цвет – серый). Вероятность проводящего узла $p = 0.27$

Fig. 1. Three-dimensional visualisation of a percolation network ($15 \times 15 \times 15$ nodes): continuous cluster between opposite edges (black), isolated connections and fragments (grey). Probability of a conducting node $p = 0.27$

каждого ребра задаётся как случайная величина, распределённая по логнормальному закону:

$$\ln(g_{lm}) \sim N(\mu_g, \sigma_g^2).$$

Логнормальное распределение адекватно описывает широкий диапазон проводимостей в дисперсных системах и гарантирует их положительную определённость. Параметры μ_g (математическое ожидание логарифма проводимости) и σ_g (стандартное отклонение) определяются совместно с другими структурными параметрами на основе экспериментальных данных для слоёв In_2O_3 , обеспечивая физическую релевантность модели.

Параметризация и верификация модели проводились на основе экспериментальных данных, полученных для наноструктурированных слоёв оксида индия (In_2O_3) [17]. Исходные образцы формировались методом осаждения водных суспензий наночастиц In_2O_3 (продукт Puraterm, CAS #1312-43-2, средний диаметр ≈ 80 нм, США) на поверхность кремниевых подложек со встречно-штыревыми системами платиновых электродов. Межэлектродный зазор составлял $l = 44.9 \pm 4.0$ мкм, ширина электродов

54.2 ± 5.2 мкм, толщина ≈ 1.6 мкм. Рабочая зона подложек имела размер 4.26×3.84 мм². После 30-минутной ультразвуковой обработки суспензии и осаждения каплей объемом 8 мкл с объемной долей частиц $\approx 2.1 \cdot 10^{-7}$ формировались ансамбли межэлектродных мостиков. Микроскопический (прибор MX51 от компании Olympus, Япония) и профилометрический (прибор Dektak 150 от компании Veeco, США) анализ показал, что мостики характеризовались средней шириной $w \approx 55$ мкм и толщиной $h \approx 108$ нм. Среднее количество мостиков в пределах рабочей зоны подложки составляло $N \approx 32$. Эксперименты по исследованию кинетики деградации проводимости проводились при пропускании постоянного тока величиной 1 нА (прибор SRS CS-580 от компании Stanford Research Systems, США). Падение напряжения $U(t)$ на образце регистрировалось с частотой дискретизации 20 Гц (прибор Agilent 34401A от компании Agilent Technologies, США) до достижения предельного значения 20 В для предотвращения пробоя. Геометрический масштаб модели ($300 \times 300 \times 15$ узлов) соответствует экспериментальной системе: расстояние между электродами (15 узлов) нормировано на межэлектродный зазор, а большая площадь YZ -плоскости обеспечивает репрезентативную статистику проводящих путей. Вероятность p назначения узла проводящим калибруется итерационно до достижения 32 непрерывных перколяционных кластеров между электродами.

Данная параметризация позволяет установить связь между модельными и экспериментальными данными, а также даёт возможность интерпретировать результаты через физические механизмы заполнения ловушек и деградацию межчастичных контактов. Универсальный характер уравнений переноса и кинетики деградации обеспечивает экстраполяцию модели на родственные материалы (например, TiO_2), демонстрирующие аналогичные переходы «полупроводник–диэлектрик». Детали экспериментальных методик приведены в соответствующем исследовании [16].

Распределение электрического потенциала ϕ_l в узлах определяется решением системы уравнений, вытекающих из законов Кирхгофа. Для каждого внутреннего узла l применяется первый закон Кирхгофа:

$$\sum_m I_{lm} = 0, \quad (2)$$



где ток I_{lm} через связь между узлами l и m определяется законом Ома:

$$I_{lm} = g_{lm}(\Phi_l - \Phi_m). \quad (3)$$

Подстановка (3) в (2) даёт систему линейных уравнений относительно потенциалов узлов:

$$\sum_m g_{lm}(\Phi_l - \Phi_m) = 0 \quad (4)$$

с граничными условиями $\Phi = V_{\text{app}}$ при $X = 1$ и $\Phi = 0$ при $X = 15$. Полученная система уравнений является крупноразмерной (порядка $300 \times 300 \times 15 = 1350000$ уравнений) но разреженной, так как каждое уравнение связано только с ближайшими соседями узла. Удобнее всего записывать её в матричной форме $A \cdot \Phi = B$, где A – разреженная симметричная матрица, а Φ – вектор, состоящий из неизвестных потенциалов поля. Для нахождения решения использовался оператор матричного левого деления MATLAB (\backslash), который инкапсулирует выбор и выполнение наиболее подходящего численного метода (например, LU-, QR-разложения) в зависимости от характеристик матрицы A . Решение Φ вычислялось непосредственно по формуле $\Phi = A \backslash B$. Протекание постоянного тока через перколяционную сеть обеспечивает непрерывный поток электронов, доступных для захвата указанными ловушками.

В рамках анализа деградации проводимости перколяционных сетей наночастиц In_2O_3 рассматриваются два взаимосвязанных механизма: снижение концентрации носителей заряда и формирование потенциального барьера на межчастичных контактах. Выбор в модели в пользу механизма, связанного с возникновением межчастичного барьера, в качестве определяющего, основан на анализе экспериментально наблюдаемой кинетики деградации. Косвенным, но убедительным подтверждением влияния именно этого механизма служат такие особенности, как крайне низкая скорость релаксации проводимости после снятия тока, свидетельствующая о необратимости захвата носителей, и нелинейный (ускоряющийся) характер роста сопротивления, указывающий на кооперативный характер разрыва проводящих путей по мере увеличения барьеров [16–18]. Эти экспериментальные факты находят последовательное объяснение в рамках гипотезы о необратимом захвате носителей глубокими ловушками, который приводит к генерации локального пространственного заряда в области контактов между частицами и, как

следствие, к значительному увеличению высоты потенциального барьера. Следует отметить, что детальное исследование относительного вклада каждого механизма представляет собой отдельную комплексную задачу, требующую дополнительного изучения с учётом электростатических взаимодействий, кинетики захвата носителей и пространственного распределения потенциала. Указанная гипотеза позволяет перейти к построению модели кинетики деградации проводимости, основанной на динамике заполнения ловушек.

Кинетика заполнения ловушек на контакте описывается упрощённым скоростным уравнением для плотности занятых ловушек n_t , где пренебрегаем процессом термического освобождения электронов, фокусируясь на необратимом захвате под действием тока. Такое приближение оправдано в условиях комнатной температуры и рассматриваемых временных масштабов эксперимента (десятки минут), для которых вероятность термической эмиссии из глубоких ловушек с энергией активации более 0.5–0.7 эВ пренебрежимо мала. Это подтверждается экспериментально наблюдаемой крайне низкой скоростью релаксации проводимости после снятия тока [16, 17], что указывает на стабильность занятого состояния ловушек в отсутствие внешних воздействий. Отметим, что данное приближение для кинетики захвата не исключает термоэмиссионного характера переноса заряда свободными носителями через межчастичные барьеры. Этот аспект учитывается в модели отдельно. Уравнение для плотности занятых ловушек n_t запишем в виде:

$$\frac{dn_t}{dt} = \frac{j\sigma_c}{e}(N_t - n_t). \quad (5)$$

Здесь j – плотность тока через контакт, σ_c обозначает эффективное сечение захвата ловушки, N_t – полную плотность ловушек в области контакта. Уравнение отражает тот факт, что скорость захвата пропорциональна плотности тока и числу доступных (свободных) ловушек $(N_t - n_t)$. Решение этого уравнения для начального условия $n_t(0) = 0$ даёт экспоненциальный рост плотности занятых ловушек со временем:

$$n_t(t) = N_t(1 - \exp(-j\sigma_c t/e)). \quad (6)$$

Каждая занятая ловушка создает локальный отрицательный заряд в области межчастичного контакта. В свою очередь совокупность таких зарядов формирует пространственную область



с потенциалом $\Delta\phi$, пропорциональным плотности зарядов n_i :

$$\Delta\phi = \gamma n_i. \quad (7)$$

Коэффициент γ выступает параметром модели, количественно определяющим вклад плотности заряженных ловушек n_i в изменение высоты потенциального барьера $\Delta\phi$. Физически γ может определяться такими признаками, как геометрией контакта (радиус кривизны частиц, ширина зазора), диэлектрической проницаемостью среды ϵ , распределением ловушек в пространстве.

В свою очередь возникающий потенциал $\Delta\phi$ проявляется как эффективность экранирования зарядами, что выражается в создании дополнительного кулоновского барьера для электронов, локальном искривлении зонной структуры, а также увеличении эффективной работы выхода².

Для термоэмиссионного механизма зависимость локальной плотности тока j принимает вид

$$\begin{aligned} j &= j_0 \exp\left(-\frac{e(\phi_b + \Delta\phi)}{k_B T}\right) = \\ &= j_0 \exp\left(-\frac{e\phi_b}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{e\gamma n_i}{k_B T}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Термоэмиссионный механизм в формуле (8) описывает перенос электронов через потенциальный барьер на межчастичном контакте, формирующем ребро перколяционной сети, и определяет локальную проводимость этого ребра. Таким образом, в модели термоэмиссия отвечает за механизм электронного транспорта между частицами, что фундаментально отличается от процесса термического освобождения электронов из ловушек, которым в рамках принятых допущений мы пренебрегаем. На макроскопическом уровне, в рамках теории перколяции, статическая проводимость σ_{dc} всей сети определяется проводимостью бесконечного перколяционного кластера и вблизи порога перколяции p_c (доли проводящих связей) подчиняется степенному закону: $\sigma_{dc} \propto (p - p_c)^{\mu_p}$ [26]³, где μ_p – критический индекс проводимости. Каждая связь в сети (межчастичный контакт) характеризуется своей эффективной проводимостью g_i , зависящей от локального барьера. По мере накопления заряда на ловушках в области контакта, локальный барьер $\Delta\phi_i$ возрастает, что приводит к уменьшению g_i . При превышении $\Delta\phi_i$ некоторого критического значения $\Delta\phi_{crit}$, вклад данной

связи в общую проводимость сети становится пренебрежимо малым, то есть связь эффективно «разрывается». Таким образом, процесс захвата электронов током вызывает уменьшение доли p эффективно проводящих связей в сети: $p(t, j) = p_0 - a n_i(t, j)$, где p_0 – исходная доля проводящих связей, a – коэффициент, связывающий среднюю по сети плотность заряженных ловушек с долей разорванных связей, а $n_i(t, j)$ – средняя плотность занятых ловушек, растущая со временем под действием тока.

Подстановка выражения для $p(t, j)$ в закон перколяции дает модель для деградации полной проводимости системы:

$$\sigma_{dc}(t) \propto [p_0 - a N_i (1 - \exp(-\sigma_c j t)) - p_c]^{\mu_p}. \quad (9)$$

Поскольку выражение в квадратных скобках монотонно уменьшается со временем при постоянной плотности тока j , проводимость $\sigma_{dc}(t)$ также монотонно снижается. Начальная скорость деградации прямо пропорциональна плотности тока j и полной плотности ловушек N_i . На больших временах $t \gg (\sigma_c j)^{-1}$ плотность занятых ловушек приближается к насыщению $n_i \approx N_i$, а проводимость асимптотически стремится к значению, определяемому выражением $[p_0 - a N_i - p_c]^{\mu_p}$. Критичность системы проявляется в том, что если $p_0 - a N_i \leq p_c$, то при насыщении ловушек проводимость падает до нуля. Представленная модель, основанная на кинетике необратимого захвата электронов ловушками на межчастичных контактах под действием постоянного тока, объясняет наблюдаемое снижение проводимости перколяционных нанокластеров In_2O_3 . Она количественно связывает скорость и степень деградации с плотностью тока, временем воздействия и фундаментальными параметрами материала – плотностью и сечением захвата ловушек, а также перколяционными характеристиками сети. Управление плотностью поверхностных ловушек через синтез и обработку поверхности наночастиц In_2O_3 составляет основу стратегии повышения устойчивости таких систем к деградации под током.

2. Математическое обоснование перехода к упрощенной модели деградации проводимости

Покажем, что при выполнении определенных условий может быть осуществлен переход к упрощенной модели деградации проводимости.

²См.: Левинштейн М. Б., Симин Г. С. Барьеры (От кристалла до интегральной схемы). М.: Наука, 1987. 320 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 65).

³См. также: Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982. 176 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 19).



Исходная модель деградации (5), учитывающая насыщение вследствие конечной плотности ловушек, описывается системой уравнений для единичного контакта. Кинетика заполнения ловушек определяется дифференциальным уравнением:

$$\frac{df_i}{dt} = \kappa j(1 - f_i), \quad (10)$$

где $f_i = n_i/N_i$ представляет безразмерную долю занятых ловушек ($0 \leq f_i \leq 1$), $\kappa = \sigma_c/e$ является эффективной константой скорости захвата, характеризующей вероятность захвата электрона на единицу плотности тока. Решение этого уравнения при начальном условии $f_i(0) = 0$ дается выражением:

$$f_i(t) = 1 - e^{-\kappa jt}. \quad (11)$$

Учитывая, что в рамках термоэмиссионного механизма локальная проводимость пропорциональна плотности тока ($\sigma \propto j$), и принимая во внимание уравнение (8), можно записать:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp(-\beta f_i), \quad (12)$$

где σ_0 – начальная проводимость, а $\beta = e\gamma N_i/k_B T$ – параметр, характеризующий чувствительность проводимости к заполнению ловушек. Подстановка решения для $f_i(t)$ дает точное выражение для эволюции проводимости:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp[-\beta(1 - e^{-\kappa jt})]. \quad (13)$$

Для перехода к упрощенной модели рассмотрим начальную стадию процесса деградации, когда выполнено условие $\kappa jt \ll 1$. Физически это означает, что время наблюдения существенно меньше характерного времени насыщения $\tau_{\text{sat}} = (\kappa j)^{-1} = e/\sigma_c j$, и доля заполненных ловушек мала $f_i \ll 1$. Применим разложение экспоненты в ряд Тейлора, ограничиваясь линейными членами:

$$e^{-\kappa jt} \approx 1 - \kappa jt. \quad (14)$$

Тогда выражение для $f_i(t)$ упрощается до:

$$f_i(t) \approx 1 - (1 - \kappa jt) = \kappa jt. \quad (15)$$

Подстановка этого приближения в формулу для проводимости дает:

$$\sigma(t) \approx \exp(-\alpha jt), \quad (16)$$

где параметр $\alpha = \beta\kappa = \frac{\gamma N_i \sigma_c}{k_B T}$ характеризует скорость деградации проводимости с течением времени.

Хорошее согласие с экспериментальными данными в нашем случае объясняется тем, что наблюдения проводились в области параметров, где условия применимости приближения выполняются. Для экстраполяции результатов за пределы начальной стадии деградации или при существенно больших плотностях тока рекомендуется использовать полную модель с насыщением, обеспечивающую более широкую физическую адекватность.

3. Полученные результаты и их сравнение с экспериментальными данными

Анализ зависимости количества непрерывных проводящих путей между электродами от доли проводящих узлов p в перколяционной сети необходим для установления связи между микроструктурными изменениями в наноструктурированном слое и макроскопическими электротранспортными свойствами. Данная зависимость (рис. 2) количественно характеризует процесс фрагментации проводящей фазы при прогрессирующей деградации, моделируемой снижением p .

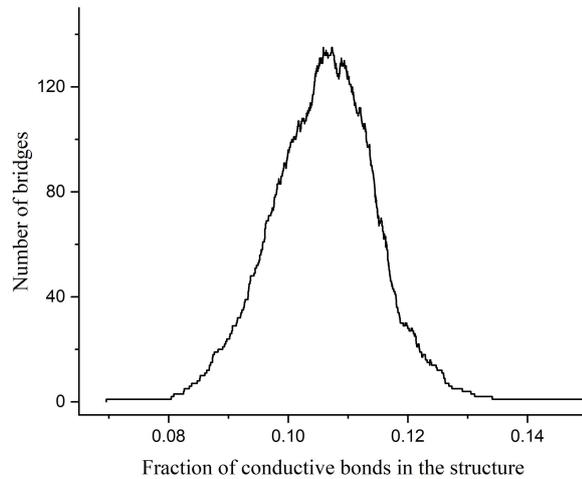


Рис. 2. Эволюция числа проводящих мостиков при уменьшении относительной плотности связей в трехмерной решетке размером $300 \times 300 \times 15$

Fig.2. Evolution of the number of bridges as the relative bond density decreases in a three-dimensional lattice of size $300 \times 300 \times 15$

При исходном значении $p \approx 0.159$ система содержит единый проводящий кластер, соединяющий электроды, что соответствует монолитному состоянию проводящей фазы. Уменьшение p до значений порядка 0.135–0.125 сопровождается увеличением количества мостиков до 15–16, что свидетельствует о фрагментации исходного кластера на параллельные проводящие пути.



Максимальное количество мостиков наблюдается в диапазоне $p \approx 0.105-0.11$. Дальнейшее снижение p ниже 0.125 приводит к резкому уменьшению количества мостиков вплоть до их полного исчезновения при $p \leq 0.08$.

Увеличение количества мостиков при уменьшении p является следствием топологической перестройки перколяционного кластера. В начальном состоянии ($p \approx 0.159$) проводящая фаза образует единый разветвленный кластер с избыточными связями. Удаление части узлов (снижение p) первоначально разрушает периферийные элементы кластера («мёртвые концы» и избыточные связи), не затрагивая основные сквозные пути. При достижении критических значений p происходит разделение единого кластера на несколько независимых проводящих путей из-за разрыва узлов, соединяющих крупные субкластеры. Последующее уменьшение p ниже значения, соответствующего максимальной фрагментации, приводит к тому, что скорость разрушения существующих независимых путей начинает преобладать над скоростью их образования за счет фрагментации более крупных кластеров. Это объясняется тем, что общее количество проводящих связей в системе становится недостаточным для поддержания сложной разветвленной структуры, способной к эффективной перестройке. В результате наблюдается монотонное снижение количества проводящих мостиков. Полное исчезновение мостиков при $p \leq 0.08$ соответствует достижению перколяционного порога, когда система теряет сквозную проводимость.

Полученная зависимость объясняет нелинейный характер деградации проводимости в экспериментальных системах. Наличие множества параллельных мостиков в диапазоне $p \approx 0.105-0.11$ обеспечивает устойчивость системы к локальным разрывам связей, тогда как крутой спад количества путей при $p < 0.105$ соответствует фазе катастрофического снижения проводимости перед переходом в диэлектрическое состояние.

Для анализа кинетики изменения ансамбля подвижных носителей заряда в наноструктурированных слоях In_2O_3 при деградации омической проводимости под действием постоянного тока регистрировалось падение напряжения на структуре.

На рис. 3 представлены экспериментальная и модельная зависимости падения напряжения

$U(t)$. Обе кривые демонстрируют схожую двухстадийную кинетику. На начальном участке (I, 0–400 с) наблюдается квазилинейный рост напряжения со средней скоростью ≈ 0.025 В/с. Данный режим соответствует постепенному обеднению ансамбля подвижных носителей вследствие захвата на ловушки.

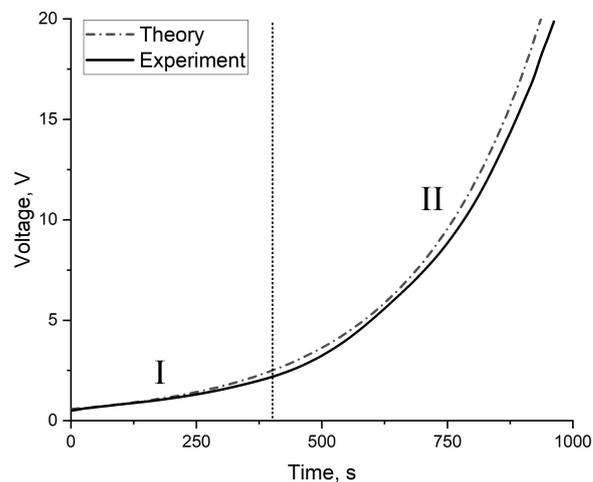


Рис. 3. Сравнение теоретического и экспериментального результатов эволюции зависимости напряжения на контактах $U(t)$ для исследуемого образца In_2O_3

Fig.3. Comparison of theoretical and experimental results of the evolution of the voltage dependence on contacts $U(t)$ for the studied sample In_2O_3

При $t > 400$ с (участок II) наблюдается нелинейное ускорение роста напряжения, достигающее максимальной скорости ≈ 0.045 В/с при $t \approx 900$ с. Эта стадия соответствует критической фрагментации проводящих путей при приближении к перколяционному порогу. Экспоненциальный характер роста на участке II обусловлен кооперативным характером разрушения перколяционной сети: разрыв отдельных связей увеличивает плотность тока на оставшихся путях, ускоряя их деградацию.

Модельная кривая качественно воспроизводит экспериментальные данные с максимальным отклонением $\leq 5\%$ на всем временном интервале. Наибольшее расхождение $\approx 4.7\%$ наблюдается в переходной области между стадиями I и II ($t \approx 350-450$ с). Наблюдаемое увеличение расхождения между моделью и экспериментом на поздних стадиях деградации может быть объяснено несколькими факторами. Во-первых, модель предполагает равномерность деградации, зависящей только от локального тока в связи. В реальной системе наночастиц In_2O_3 могут существовать дополнительные механизмы деградации, такие как термические эффекты из-за



локального нагрева в областях с высокой плотностью тока, или электрохимические процессы, активирующиеся при сравнительно высоких напряжениях. Эти факторы не учтены в текущей версии модели и могут приводить к ускоренному росту сопротивления в эксперименте. Во-вторых, предположение о постоянной величине α в законе деградации может быть упрощением; показатель α сам может зависеть от локальных условий (температуры, степени деградации материала связи). В-третьих, модель использует идеализированную кубическую решетку, в то время как реальная морфология стохастических мостиков из наночастиц характеризуется большей нерегулярностью, флуктуациями в контактном сопротивлении между частицами и возможным наличием кластеров сложной формы, влияющих на распределение токов.

Заключение

Разработанная дискретная перколяционная модель, основанная на расчете распределения токов в решетке и электростимулированной деградации связей, успешно воспроизводит качественную картину кинетики деградации напряжения в стохастических структурах из наночастиц In_2O_3 на подложках с встречно-штыревыми электродами. Модель демонстрирует хорошее количественное согласие с экспериментом на начальных и средних стадиях процесса. Наблюдаемое усиление расхождения на поздних стадиях деградации указывает на необходимость уточнения модели путем включения дополнительных физических механизмов разрушения, актуальных для реальных наноматериалов, таких как окисление или локальный перегрев. Полученные результаты подтверждают адекватность перколяционного подхода для описания электропроводности и ее деградации в системах со стохастической наноструктурой и предоставляют основу для прогнозирования долговечности подобных устройств. Дальнейшая работа будет направлена на усовершенствование модели с учетом выявленных факторов для достижения более точного количественного соответствия на всех этапах деградационного процесса.

Список литературы / References

1. Singh S., Das S., Ray S. K. Progress in group-IV semiconductor nanowires based photonic devices. *App. Phys. A*, 2023, vol. 129, art. 216. <https://doi.org/10.1007/s00339-023-06483-7>

2. Sohail M. T., Wang M., Shareef M., Yan P. A review of ultrafast photonics enabled by metal-based nanomaterials: Fabrication, integration, applications and future perspective. *Infrared Phys. Technol.*, 2024, vol. 137, art. 105127. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2024.105127>
3. Chao J., Wang G., Qiu P., Sun H., Wang Y., Duan X., Zhang J., Lyu Y., Ahmad I., Fu B. Optical properties and applications of metal nanomaterials in ultrafast photonics: A review. *J. Mater. Sci.*, 2024, vol. 59, iss. 29, pp. 13433–13461. <https://doi.org/10.1007/s10853-024-09993-8>
4. Raha S., Ahmaruzzaman M. ZnO nanostructured materials and their potential applications: Progress, challenges and perspectives. *Nanoscale Advances*, 2022, vol. 4, iss. 8, pp. 1868–1925. <https://doi.org/10.1039/D1NA00880C>
5. Noreen S., Tahir M. B., Hussain A., Nawaz T., Rehman J. U., Dahshan A., Alrobei H. Emerging 2D-Nanostructured materials for electrochemical and sensing Application-A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, vol. 47, iss. 2, pp. 1371–1389. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.044>
6. Ansari A., Ahmed S., Siddiqui M. A., Khan A., Tailor S., Kumar P., Negi D. S. PEDOT: PSS, TiO_2 nanoparticles and carbon quantum dot composites as ultraviolet sensors. *ACS Applied Nano Materials*, 2024, vol. 7, iss. 8, pp. 9789–9799. <https://doi.org/10.1021/acsnm.4c01897>
7. Ren X., Xu Z., Liu D., Li Y., Zhang Z., Tang Z. Conductometric NO_2 gas sensors based on MOF-derived porous ZnO nanoparticles. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2022, vol. 357, art. 131384. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2022.131384>
8. de Lima B. S., Komorizono A. A., Ndiaye A. L., Bernardi M. I. B., Brunet J., Mastelaro V. R. Tuning the gas sensing properties of rGO with In_2O_3 nanoparticles. *Surfaces*, 2022, vol. 5, iss. 1, pp. 127–142. <https://doi.org/10.3390/surfaces5010006>
9. Kumar N., Patel M., Nguyen T. T., Kim S., Kim J. Effect of TiO_2 layer thickness of TiO_2/NiO transparent photovoltaics. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2021, vol. 29, iss. 8, pp. 943–952. <https://doi.org/10.1002/pip.3419>
10. Tran M. H., Bae J. S., Hur J. Self-powered, transparent, flexible and solar-blind deep-UV detector based on surface-modified TiO_2 nanoparticles. *Applied Surface Science*, 2022, vol. 604, art. 154528. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.154528>
11. Ge S., Sang D., Zou L., Yao Y., Zhou C., Fu H., Wang C. A review on the progress of optoelectronic devices based on TiO_2 thin films and nanomaterials. *Nanomaterials*, 2023, vol. 13, iss. 7, art. 1141. <https://doi.org/10.3390/nano13071141>
12. Sun S., Zhang M., Bian J., Xu T., Su J. $\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}$ heterojunction thin film transistor for high recognition accuracy neuromorphic computing and optoelectronic artificial synapses. *Nanotechnology*, 2024, vol. 35, no. 36, art. 365602. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ad5685>



13. Coetzee D., Venkataraman M., Militky J., Petru M. Influence of nanoparticles on thermal and electrical conductivity of composites. *Polymers*, 2020, vol. 12, iss. 4, art. 742. <https://doi.org/10.3390/polym12040742>
14. Khelifa H., Beroual A., Vagnon E. Effect of conducting and semiconducting nanoparticles on the AC breakdown voltage and electrostatic charging tendency of synthetic ester. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 2023, vol. 30, iss. 4, pp. 1414–1421. <https://doi.org/10.1109/TDEI.2023.3261825>
15. Lund P. D., Hashmi G., Ma Y., Patakangas J., Jing Y. Degradation and stability of nanostructured energy devices. *Microelectronic Engineering*, 2014, vol. 126, pp. 49–53. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2014.05.002>
16. Zimnyakov D., Volchkov S., Vasilkov M., Plugin I., Varezchnikov A., Gorshkov N., Ushakov A., Tokarev A., Tsy-pin D., Vereshagin D. Semiconductor-to-insulator transition in inter-electrode bridge-like ensembles of anatase nanoparticles under a long-term action of the direct current. *Nanomaterials*, 2023, vol. 13, iss. 9, pp. 1490–1506. <https://doi.org/10.3390/nano13091490>
17. Kochkurov L. A., Volchkov S. S., Vasilkov M. Y., Plugin I. A., Klimova A. A., Zimnyakov D. A. Degradation of conductivity of low-dimensional nanostructured semiconductor layers under long-term dc current flow. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 1, pp. 41–51 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-1-41-51>, EDN: AUQNBD
18. Kochkurov L. A., Tsy-pin D. V., Volchkov S. S., Zimnyakov D. A. Specific features of charge transfer fluctuations in disperse structures based on anatase nanoparticles near the percolation threshold. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 3, pp. 262–270 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-3-262-270>, EDN: RHDYLS
19. Sze S. M., Li Y., Ng K. K. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., 2021. 944 p. (Russ. ed: Moscow, Mir, 1984, vol. 1. 455 p.)
20. Chatratin I., Sabino F. P., Reunchan P., Limpijumnong S., Varley J. B., Van de Walle C. G., Janotti A. Role of point defects in the electrical and optical properties of In_2O_3 . *Phys. Rev. Mater.*, 2019, vol. 3, iss. 7, art. 074604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.074604>
21. Kozhushner M. A., Lidskii B. V., Oleynik I. I., Posvyanskii V. S., Trakhtenberg L. I. Inhomogeneous charge distribution in semiconductor nanoparticles. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, vol. 119, iss. 28, pp. 16286–16292. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b01410>
22. Malagu C., Guidi V., Stefancich M., Carotta M. C., Martinelli G. Model for Schottky barrier and surface states in nanostructured n-type semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 2002, vol. 91, iss. 2, pp. 808–814. <https://doi.org/10.1063/1.1425434>
23. Šuvakov M., Tadić B. Modeling collective charge transport in nanoparticle assemblies. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2010, vol. 22, iss. 16, art. 163201. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/16/163201>
24. Cho I., Song Y., Cheong S., Kim Y., Cho, J. Layer-by-layer assembled oxide nanoparticle electrodes with high transparency, electrical conductivity and electrochemical activity by reducing organic linker-induced oxygen vacancies. *Small*, 2020, vol. 16, iss. 8, art. 1906768. <https://doi.org/10.1002/sml.201906768>
25. Spencer M. P., Alsaati A. A., Park J. E., Nogueira Branco R. B., Marconnet A., Yamamoto N. Tuning interparticle contacts and transport properties of Maghemite–Thermoset nanocomposites by applying oscillating magnetic fields. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, vol. 14, iss. 14, pp. 16601–16610. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c00331>
26. Shklovskii B. I., Efros A. L. *Electronic properties of doped semiconductors*. Springer Series in Solid-State Sciences, vol. 45. Berlin, Springer, 1984. xii+388 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-02403-4> (Russ. ed: Moscow, Nauka, 1979. P. 126–128, 133–139, 159–165).

Поступила в редакцию 11.09.2025; одобрена после рецензирования 07.10.2025; принята к публикации 10.10.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 11.09.2025; approved after reviewing 07.10.2025; accepted for publication 10.10.2025; published 31.03.2026



НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОМАТЕРИАЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 72–83
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 72–83
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-72-83>, EDN: OJRGOP

Научная статья
УДК 535.372

Гидротермальная функционализация золотых наночастиц фолиевой кислотой и полиэтиленгликолем

А. М. Абрамова[✉], К. Р. Калишина, Е. А. Зобнина, И. Ю. Горячева

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

Абрамова Анна Михайловна, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории неорганической химии Института химии, abramovaam@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0666-7685>, AuthorID: 1006054

Калишина Ксения Романовна, студент кафедры общей и неорганической химии Института химии, 19032003ksyusha@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-2126-292X>

Зобнина Екатерина Алексеевна, студент кафедры общей и неорганической химии Института химии, zobnina_e2002@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-0832-295X>

Горячева Ирина Юрьевна, доктор химических наук, профессор кафедры общей и неорганической химии Института химии, goryachevaiv@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1781-6180>, AuthorID: 50556

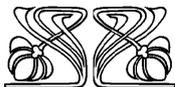
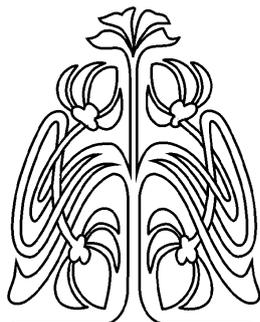
Аннотация. В статье представлена комплексная методика гидротермального синтеза, предназначенная для одновременной модификации наночастиц золота с использованием фолатов и производных полиэтиленгликоля, содержащих концевые аминогруппы. Данная методология обеспечивает высокую степень функционализации наночастиц золота, что подтверждается изменениями ζ -потенциала и модификацией люминесцентных характеристик. В данной статье показан одноэтапный синтез люминесцентных наноструктур золота из фолиевой кислоты и полиэтиленгликоля, изучено влияние длины полимерной цепи и количества аминогрупп на оптические свойства синтезированных структур. Выбор фолиевой кислоты обусловлен способностью ее молекул выступать в роли целевых лигандов, специфически взаимодействующих с рецепторами клеточных мембран. Полимеры на основе полиэтиленгликоля с концевыми аминогруппами были выбраны для увеличения времени циркуляции наночастиц в биологических средах благодаря их высокой биосовместимости и способности формировать стабильные комплексы с функциональными группами. Применение гидротермального синтеза обусловлено его способностью обеспечивать контролируемую модификацию наночастиц при воздействии высоких температур и давления, что способствует равномерному распределению функциональных групп и повышению стабильности получаемых композитных материалов.

Ключевые слова: золотые наночастицы, полимеры, фолиевая кислота, функционализация, гидротермальный синтез

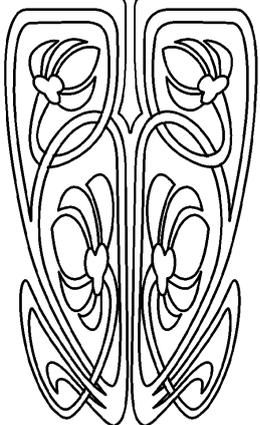
Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-01171, <https://rscf.ru/project/23-73-01171/>).

Для цитирования: Абрамова А. М., Калишина К. Р., Зобнина Е. А., Горячева И. Ю. Гидротермальная функционализация золотых наночастиц фолиевой кислотой и полиэтиленгликолем // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 72–83. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-72-83>, EDN: OJRGOP

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



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





Article

Simultaneous functionalization of gold nanoparticles with folic acid and polyethyleneglycolA. M. Abramova[✉], K. R. Kalishina, E. A. Zobnina, I. Yu. Goryachevaa

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

Anna M. Abramova, abramovaam@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0666-7685>Kseniya. R. Kalishina, 19032003ksyusha@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-2126-292X>Ekaterina A. Zobnina, zobnina_e2002@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-0832-295X>Irina Yu. Goryachevaa, goryachevaiy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1781-6180>

Abstract. Background and Objectives: This article presents a comprehensive hydrothermal synthesis for the simultaneous modification of gold nanoparticles using folates and polyethyleneglycol containing terminal amino groups. This methodology ensures a high degree of functionalization of gold nanoparticles, as evidenced by changes in the ζ -potential and modification of luminescent characteristics. This article demonstrates the one-step synthesis of luminescent gold nanostructures from folic acid and polyethyleneglycol, and examines the influence of the polymer length and the number of amino groups on the optical properties of the synthesized structures. **Materials and Methods:** Folic acid was chosen due to its ability to act as targeting ligands, specifically interacting with cell membrane receptors. Polymers based on polyethyleneglycol with terminal amino groups were chosen to increase the circulation time of nanoparticles in biological environments due to their high biocompatibility and ability to form stable complexes with functional groups. The use of hydrothermal synthesis is driven by its ability to provide controlled modification of nanoparticles under high temperatures and pressure. This facilitates the uniform distribution of functional groups and increases the stability of the resulting composite materials. **Results:** The use of the hydrothermal synthesis method is able to provide controlled modification of nanoparticles under the influence of high temperatures and pressure. This contributes to a uniform distribution of functional groups and increases the stability of the resulting composite materials. **Conclusions:** Thus, the feasibility of functionalizing AuNPs with folates and polymers via a single-step hydrothermal synthesis was demonstrated, and the influence of the polymer length and the number of amino groups on the optical properties of the synthesized structures was studied. Modified AuNPs can be used for selective nanoparticle internalization into tumor cells. Future studies will demonstrate the stability and limited targeting of these conjugates in vivo. These results will be an important stepping stone for future research in cancer cell imaging, tumor ablation, and drug development.

Keywords: gold nanoparticles, polymers, folic acid, functionalization, hydrothermal synthesis

Acknowledgments: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-73-01171, <https://rscf.ru/project/23-73-01171/>).

For citation: Abramova A. M., Kalishina K. R., Zobnina E. A., Goryachevaa I. Yu. Simultaneous functionalization of gold nanoparticles with folic acid and polyethyleneglycol. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 72–83 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-72-83>, EDN: OJRGOP

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

Введение

В настоящее время большое количество наночастиц (НЧ) применяется для исследований в медицине, биологии и тераностике. Среди них наибольший интерес привлекли НЧ благородных металлов, в частности золота, в связи с их уникальными оптическими и каталитическими свойствами [1], а также большим разнообразием форм [2]. Интерес к наночастицам золота (AuНЧ) обусловлен их интенсивным плазмонным поглощением, используемым во многих областях науки для обнаружения, визуализации и мониторинга [3–6]. AuНЧ прекрасно подходят для фототермической терапии, доставки лекарств и диагностики [5, 6]. Особенностью AuНЧ является ярко-красный цвет коллоидного раствора, обусловленный поверхностно-плазмонным резонансом (ППР) [7–9]. Уникальные плазмонные свойства коллоидного золота возникают из-за ограниченного размера наночастицы [9]. ППР зависит от размера

частиц, формы, морфологии агрегата, модификации поверхности, диэлектрических свойств и показателя преломления. Например, максимум полосы ППР сферической AuНЧ диаметром 16 нм составляет около 520 нм, а у частицы с диаметром 5–6 нм – около 400 нм [10, 11].

Методы синтеза AuНЧ постоянно совершенствуются: синтез проводят в водных [12–15] (реже – в органических [16–18]) растворах при различных значениях pH, используя разнообразные восстановители, что позволяет улучшить контроль размера, формы и свойств. Варьирование условий синтеза позволяет изменить размер и форму AuНЧ, при этом актуальными остаются вопросы повышения коллоидной стабильности (прежде всего – в биологических средах) и визуализации расположения AuНЧ в тканях и органах [19–22].

Для того, чтобы решить эти проблемы, прибегают к функционализации AuНЧ, так как поверхность этих частиц позволяет провести модификацию различными функциональ-



ными соединениями [23–28]. Функционализация AuНЧ полиэтиленгликолем позволяет улучшить их стабильность в водных средах и увеличить время нахождения в кровотоке [19, 29, 30]. AuНЧ часто конъюгируют с так называемыми «направленными» лигандами для увеличения терапевтического эффекта в фототермической терапии онкологических заболеваний. Одним из таких лигандов является фолиевая кислота (ФК), которая является основой и связующим звеном для коферментов, участвующих в синтезе нуклеотидов и аминокислот, поскольку рецепторы ФК экспрессируются в больших количествах на поверхности раковых клеток [7]. ФК, она же витамин В9, необходима для роста и развития клеток, помогает формировать фрагменты ДНК и РНК. Преимуществами использования фолатов (Ф) в качестве функционализирующего агента являются высокая избирательность соответствующих рецепторов и безопасная для организма интернализация фолат-содержащих компонентов клетками [31, 32]. Модификация фолиевой кислотой поверхности AuНЧ позволяет усовершенствовать материалы для опосредованной целевой доставки.

Используемые в настоящее время подходы к модификации AuНЧ фолатами можно классифицировать по типу связывания. Самый распространенный подход основан на использовании ковалентного связывания [22, 33, 34]. Следующий подход базируется на электростатическом взаимодействии между AuНЧ и функционализирующим агентом [35, 36].

В одной из первых работ, посвященных одновременной модификации AuНЧ ФК и полимерами [36], продемонстрирована методика связывания ФК с AuНЧ через аминокислотные группы полимерных соединений путем инкубации при комнатной температуре в течение нескольких часов.

Целями работы являются: получение люминесцентных AuНЧ, модифицированных фолатами и полимерами, с помощью гидротермального синтеза; выявление влияния длины углеродного скелета и количества аминокислотных групп на оптические свойства синтезированных структур.

Фолиевая кислота используется в качестве таргетного направленного лиганда, выбор полимеров на основе полиэтиленгликоля (ПЭГ) с концевыми аминокислотными группами (коммерческое название Джеффамин, ДА) обусловлен их способностью увеличивать время нахождения НЧ в кровотоке.

1. Материалы и методы

1.1. Синтез и гидротермальная функционализация наночастиц золота

Для синтеза AuНЧ использовали золотохлористую водородную кислоту (ЗХВК) (Acros organics, США), раствор цитрата натрия (ч, Химмед, Россия). Наночастицы золота получали по классической методике, предложенной Френсом [7] и модифицированной Туркевичем [8]. В колбу вносили 50 мл дистиллированной воды и нагревали до кипения, после чего впрыскивали 143 мкл ЗХВК (0.1 М). По истечении 5 мин добавляли 1 мл водного раствора цитрата натрия (1%). Нагревали в течение 10 мин, после чего останавливали синтез путем остывания на воздухе. В результате получали раствор малинового цвета с конечной концентрацией AuНЧ $2.2 \cdot 10^{-12}$ М. Размеры полученных в результате синтеза AuНЧ определяли методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с использованием просвечивающего электронного микроскопа (JEOL 2010, Япония). Для модификации поверхности AuНЧ использовали фолиевую кислоту (Sigma-Aldrich, США) и полимеры Джеффамин М1000 (ПЭГ 1) и Джеффамин ЕД 2003 (ПЭГ 2) (Sigma-Aldrich, США). Структурные формулы используемых соединений представлены в табл. 1.

К 3 мл раствора AuНЧ добавляли водный раствор полимера ПЭГ 1 или ПЭГ 2, конечная концентрация полимера составляла 0.5 г/моль. Далее к полученной смеси был добавлен раствор ФК ($1 \cdot 10^{-4}$ М). В течение часа растворы перемешивали, а затем подвергли гидротермальному синтезу. Полученные образцы обозначали как AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 и AuНЧ–Ф–ПЭГ 2.

Гидротермальный синтез (рис. 1) проводили в муфельной печи (СНОЛ-ТЕРМ, Россия) по следующей методике: образцы помещали в стеклянные стаканы объемом 4 мл, стаканы помещали в тефлоновые вкладыши, затем тефлоновые вкладыши загружали в металлические автоклавы. Функционализацию проводили при температуре 200°C в течение 60 мин, поскольку ранее в работах [37, 38] было выяснено оптимальное время термической обработки фолиевой кислоты.

Оптические свойства исходных и модифицированных AuНЧ характеризовали методами спектрофотометрии (Shimadzu UV-1800, Япония) и флуориметрии (Cary Eclipse, Австралия).

Структурные формулы соединений
Structural formulas of compounds

Соединения / Compounds	Структурные формулы / Structural formulas
Фолиевая кислота / Folic acid	
Джеффамин М1000 (ПЭГ 1) / Jeffamine M 1000 (PEG 1)	
Джеффамин ЕД 2003 (ПЭГ 2) / Jeffamine ED2003 (PEG 2)	

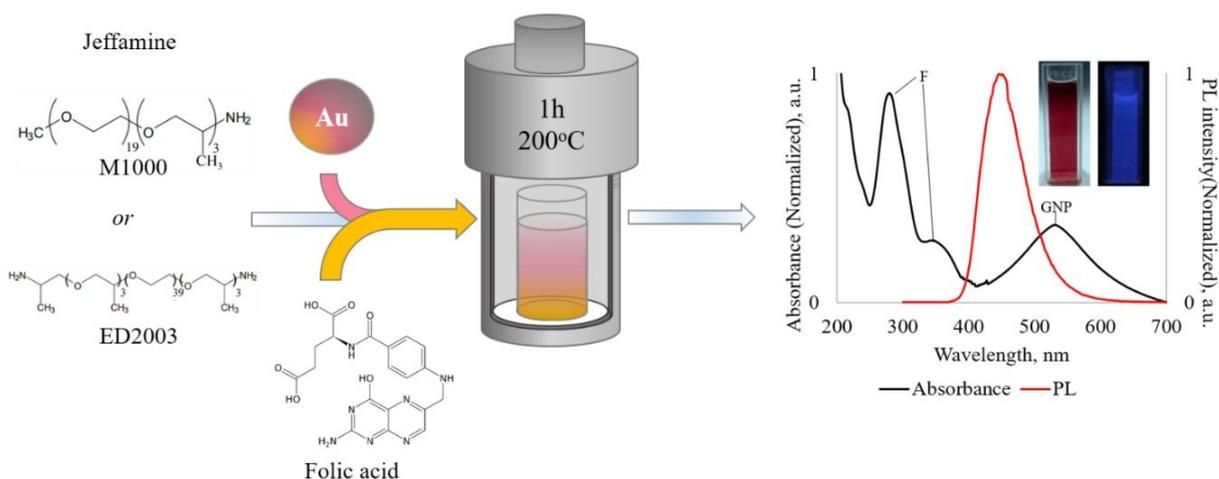


Рис. 1. Схема синтеза
Fig. 1. Scheme of the synthesis

Значения ζ -потенциала AuНЧ в растворах получали на анализаторе Zetasizer Nano ZS (Malvern Panalytical, Малверн, Великобритания).

1.2. Оценка коллоидной стабильности полученных функционализированных золотых наночастиц

В работе проводились специальные исследования по оценке коллоидной стабилизации поверхности наночастиц золота. Оценка температурной и физиологической стабильности проводили с использованием полистирольной

микропланшета, где в трех параллелях помещали по 0.1 мл образцы AuНЧ, AuНЧ-Ф-ПЭГ 1, AuНЧ-Ф-ПЭГ 2. Процесс агрегации частиц характеризовали по спектрам поглощения.

Термическую стабильность наночастиц золота (AuНЧ), модифицированных фолатом и полиэтиленгликолями (ПЭГ 1 и ПЭГ 2), проверяли при воздействии как высокой, так и низкой температуры.

В первом случае образцы AuНЧ, AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 и AuНЧ-Ф-ПЭГ 2 подвергали термической обработке при температуре 85°C в течение 12 ч. Данный режим моделирования тер-



модеструкции позволил оценить структурную устойчивость наночастиц в экстремальных температурных условиях, которые могут возникать в различных технологических процессах или биомедицинских опытах.

В случае криогенного воздействия для оценки влияния низких температур на морфологию и функциональные свойства наночастиц образцы AuНЧ, AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 и AuНЧ-Ф-ПЭГ 2 подвергали криоконсервации при температуре -18°C в течение 12 ч. Этот подход позволил изучить поведение наночастиц в условиях, имитирующих длительное хранение при криогенных температурах, что является важным аспектом для разработки стабильных фармацевтических препаратов или криогенных носителей для биомедицинских применений.

Физиологическая стабильность. В рамках исследования коллоидной устойчивости биоматериалов к процессам агрегации был проведен ряд экспериментов, направленных на оценку влияния буферных систем и белковых добавок на сохранение их структурных и функциональных характеристик.

Для контроля к образцам добавляли 0.1 мл дистиллированной воды. В параллельной серии опытов в образцы вводили 0.1 мл фосфатно-солевого буфера (ФСБ) с $\text{pH} = 7.4$ и концентрацией 0.15 М, что позволило исследовать стабилизирующие свойства данного буферного раствора.

Отдельная группа образцов была использована для проведения серии экспериментов с введением 0.1 мл раствора бычьего сывороточ-

ного альбумина (БСА) с концентрацией 2 мг/мл. Эти манипуляции были направлены на изучение протекторного эффекта БСА в условиях, моделирующих физиологическую среду. Такой подход позволил провести комплексную оценку влияния различных внешних факторов на стабильность исследуемых материалов, что является ключевым аспектом в понимании молекулярных механизмов их устойчивости к деградации.

Полученные результаты имеют важное значение для разработки методов консервации и хранения биоматериалов, а также для более глубокого понимания их физико-химических свойств и потенциальных областей применения.

2. Результаты и их обсуждение

AuНЧ синтезировали методом цитратного восстановления из ЗХВК. На рис. 2, а приведено ПЭМ-изображение полученных AuНЧ, которые представляют собой монодисперсные образования сферической формы со средним диаметром 16 нм.

При одновременном добавлении к AuНЧ растворов ФК и ПЭГ происходит смещение полосы ППР в красную область спектра (рис. 3, а) для Ф-ПЭГ 1 и Ф-ПЭГ 2 на 46 нм. Согласно литературным данным [39–42] сдвиг наблюдается в результате изменения значения диэлектрической проницаемости в непосредственном окружении AuНЧ, что является косвенным показателем того, что полимеры и ФК находятся в непосредственной близости от поверхности AuНЧ.

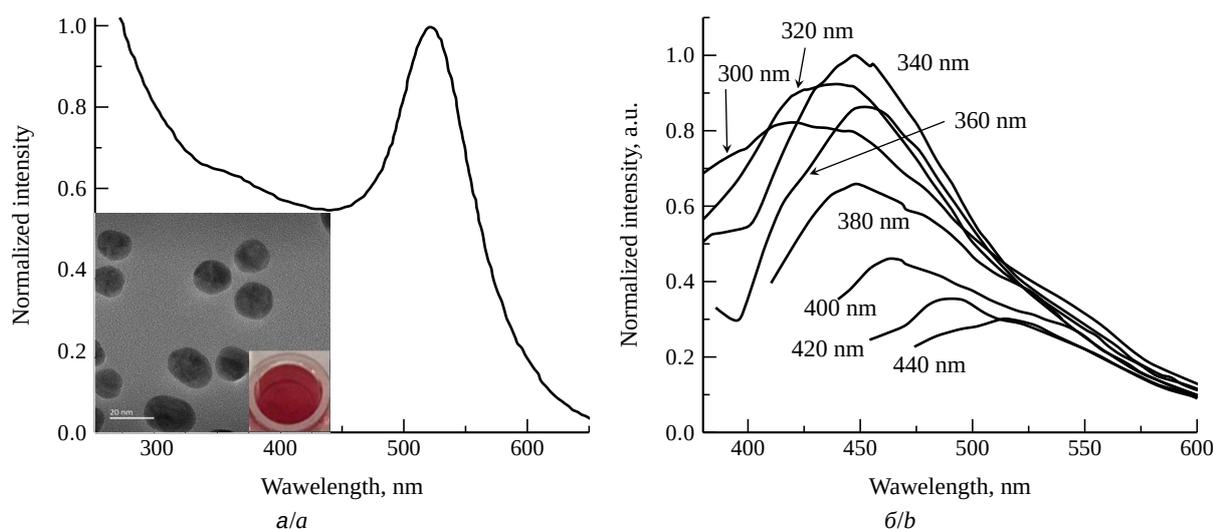


Рис. 2. Спектр поглощения со вставкой микрофотографии AuНЧ, полученной методом ПЭМ, шкала 20 нм (а) и спектр флуоресценции (б)

Fig. 2. Absorption spectra (a) (insert: micrograph of Au NPs obtained by TEM, scale bar 20 nm) and fluorescence spectra, a.u. (b)



Одностадийную гидротермальную функционализацию AuНЧ проводили по методике, ранее описанной в нашей работе [37]. После гидротермального синтеза положение пика ППР для всех образцов остается без изменений (см. рис. 3, а) и составляет 534–537 нм для AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 и AuНЧ–Ф–ПЭГ 2. Отсутствие сдвига в результате гидротермальной обработки свидетельствует о постоянном значении диэлектрической проницаемости среды, непосредственно прилегающей к поверхности AuНЧ, и указывает на присутствие модификаторов на поверхности.

Известно, что AuНЧ, полученные методом цитратного восстановления, имеют лишь чрезвычайно слабую эмиссию с максимумом 435 нм при длине волны возбуждения 340 нм (см. рис. 2, б). Для оценки влияния модифицирующих составов на люминесцентные свойства полученных наночастиц, регистрировали испускание при длине волны возбуждения 360 нм (рис. 3, б). При введении модифицирующих агентов интенсивность эмиссии увеличивается, положение максимума сдвигается в область 460 нм (рис. 3, з). В результате гидротермального синтеза раствора AuНЧ изменения в спектрах испускания отсутствуют, а в присутствии фолиевой кислоты происходит для AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 уменьшение интенсивности флуоресценции в 1.5 раза и для AuНЧ–Ф–ПЭГ 2 увеличение интенсивности флуоресценции в 2.2 раза (см. рис. 3, з).

Другим критерием эффективности гидротермальной функционализации служило изменение значения ζ -потенциала (табл. 2).

Установлено, что после гидротермальной обработки значения ζ -потенциала по модулю увеличиваются. Важно отметить резкое изменение профиля спектральных линий для AuНЧ с модифицирующими агентами, а так же увеличение значения ζ -потенциала по сравнению с AuНЧ, обработанных без ФК и ПЭГ. Это является косвенным доказательством модификации поверхности AuНЧ.

Основываясь на приведенных выше данных, мы провели ряд исследований по оценке стабилизации поверхности наночастиц золота. Результаты показали (рис. 4), что ПЭГ существенно повышает устойчивость наночастиц к воздействию температуры и изменениям фазы по сравнению с наночастицами, которые не были стабилизированы.

AuНЧ без функционализации, AuНЧ–Ф–ПЭГ 1, AuНЧ–Ф–ПЭГ 2 выдерживали при 85°C в течение 12 час для определения

термической стабильности. Цвет растворов и спектры поглощения AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 и AuНЧ–Ф–ПЭГ 2 были практически неизменными (относительная оптическая плотность (ООП) $\sim 95\%$), что говорит о превосходной устойчивости дисперсии к нагреванию. Относительная оптическая плотность была рассчитана путем деления значения абсорбции при λ_{max} после испытаний на значение до испытаний. Следует подчеркнуть, что в рамках гидротермальной функционализации, осуществляемой при температуре 200°C, наблюдается агрегирование наночастиц золота стабилизированных цитратом. В то же время при добавлении ФК и ПЭГ в реакционную смесь пик ППР сохраняется. Это явление указывает на стабилизацию AuНЧ в присутствии указанных стабилизаторов, что имеет важное значение для разработки наноструктурированных материалов с заданными оптическими и химическими свойствами.

Кроме того, при замораживании (-18°C) AuНЧ без ФК и ПЭГ становятся серовато-синими из-за агрегации (см. рис. 4, б). После размораживания были записаны спектры поглощения, демонстрирующие bathochromный сдвиг максимума излучения λ_{max} (для AuНЧ – 0 нм; для AuНЧ–Ф–ПЭГ 1–550 нм; для AuНЧ–Ф–ПЭГ 2–556 нм). ООП по сравнению с тем, что до замораживания составляла AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 (ООП = 80%) и AuНЧ–Ф–ПЭГ 2 (ООП = 60%) сохранялась после размораживания, демонстрируя что ПЭГ-гилирование обеспечивает диспергируемость в замороженном состоянии.

Для глубокого понимания и точного прогнозирования поведения коллоидных систем критически важными контролируемыми параметрами являются коагуляция и стабилизация. Стабилизация коллоидных систем требует оценки оптимальной концентрации стабилизатора, предотвращающей коагуляцию частиц. Этот параметр имеет первостепенное значение для обеспечения устойчивости коллоидных суспензий, что особенно важно в контексте разработки новых материалов и технологий.

В рамках исследования коллоидной устойчивости биоматериалов к процессам агрегации был проведен ряд экспериментов, направленных на оценку влияния различных буферных систем и белковых добавок на сохранение их структурных и функциональных характеристик. К одной серии образцов добавляли раствор ФСБ и к другой раствор БСА. Эти манипуляции были

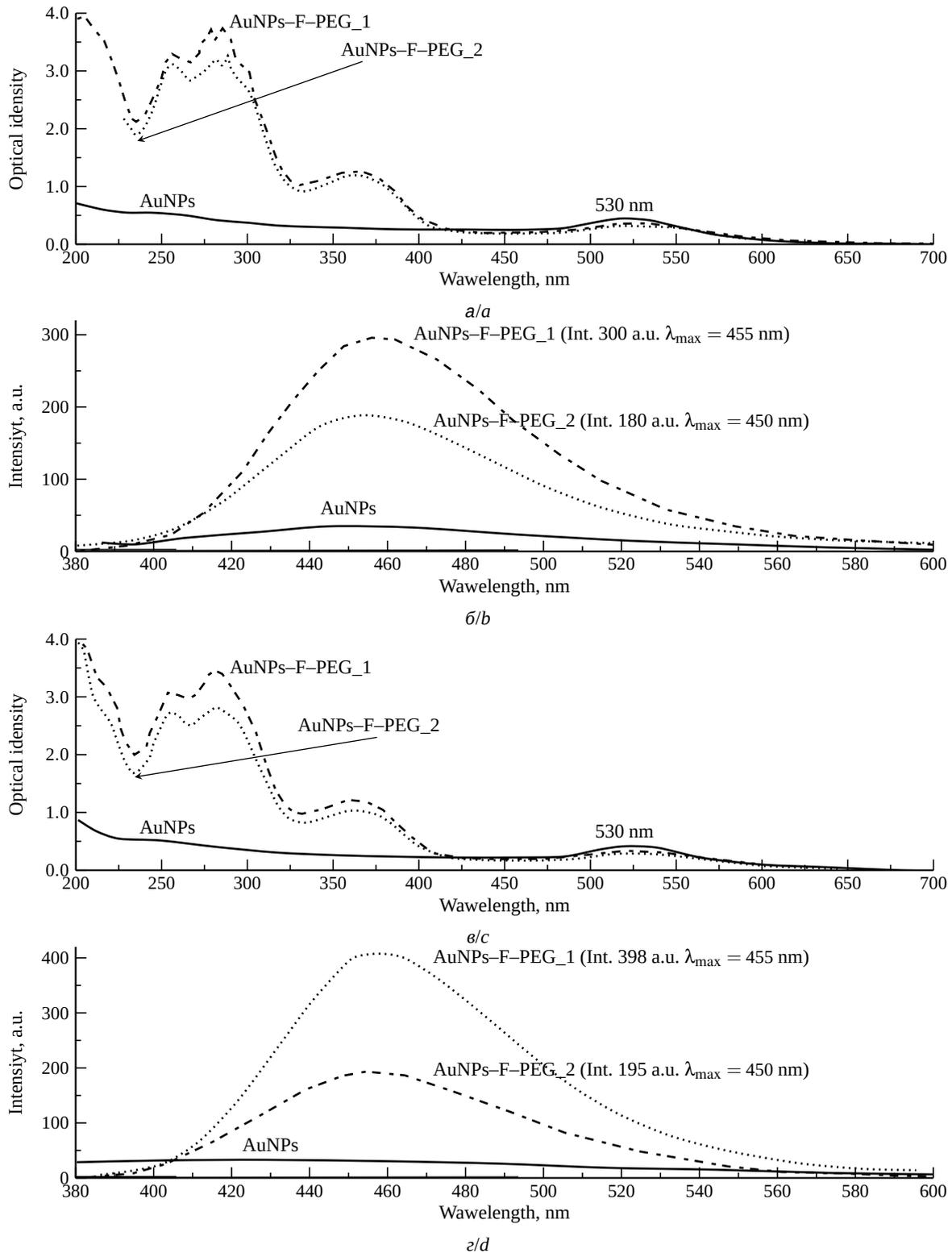


Рис. 3. Спектры поглощения (а и в) и испускания (б и г) при длине волны возбуждения 360 нм до гидротермальной функционализации (а, б) и после нее (в, г): для растворов AuНЧ (сплошная линия), AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 (штрих-пунктирная линия), AuНЧ-Ф-ПЭГ 2 (точечная кривая линия). Растворы разбавлены в 10 раз до (а, б) и после (в, г) гидротермальной функционализации

Fig. 3. Spectra of absorption (a and c) and emission (b and d) at wavelengths 360 nm for solutions of AuNPs (solid), AuNPs-F-PEG 1 (dashed-dotted), AuNPs-F-PEG 2 (dotted). The solutions are diluted 10 times before (a, b) and after (c, d) hydrothermal functionalization

Распределение ζ -потенциала, мВ
Distribution of ξ -potential, mV

Образец / Sample	Гидротермальная функционализация / Hydrothermal functionalization	
	До / Before	После / After
AuНЧ / AuNPs	-5.6 ± 0.9	-10 ± 6
AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 / AuNPs-F-PEG 1	–	-20.8 ± 3
AuНЧ-Ф-ПЭГ 2 / AuNPs-F-PEG 2	–	-28.8 ± 3

направлены на изучение протекторного эффекта в условиях, моделирующих физиологическую среду. Такой подход позволил провести комплексную оценку влияния различных внешних факторов на стабильность исследуемых материалов, что является ключевым аспектом в понимании молекулярных механизмов их устойчивости к деградации.

Полученные результаты имеют важное значение для разработки методов консервации и хранения биоматериалов, а также для более глубокого понимания их физико-химических свойств и потенциальных областей применения.

В присутствии хлорида натрия и других электролитов наблюдается агрегация, обусловленная увеличением ионной силы. Этот процесс приводит к образованию соли с цитратом на поверхности золотых наночастиц, что нивелирует их поверхностный заряд.

В ходе проведенных исследований было установлено, что AuНЧ демонстрируют повышенную стабильность в присутствии ПЭГ. Данное наблюдение свидетельствует о формировании защитной оболочки вокруг частиц золота, что препятствует их агрегации и обеспечивает устойчивость в различных средах. Обнаруженное повышение стабильности AuНЧ в присутствии ПЭГ открывает перспективы их применения в биологических системах, функционирующих в условиях, приближенных к физиологическим параметрам.

Механизмы, обуславливающие эту стабильность, включают гидрофилизацию поверхности AuНЧ за счет взаимодействия ПЭГс молекулами воды, что снижает поверхностную энергию частиц и предотвращает их слипание. Кроме того, ПЭГ может действовать как стабилизатор, предотвращая адсорбцию дестабилизирующих агентов, таких как белки и электролиты.

Таким образом, дисперсионная стабильность AuНЧ, AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 и AuНЧ-Ф-ПЭГ 2 была проверена при типичных физиологических усло-

виях: pH = 7.4, 150 mM NaCl. К дисперсиям добавляли физиологический раствор фосфатно-солевого буфера десятикратной концентрации для достижения предполагаемого физиологического состояния. Цвет AuНЧ сразу после добавления концентрированного буфера изменился на серовато-синий и в конечном итоге AuНЧ выпали в осадок (рис. 4, в). Напротив, не наблюдалось изменения цвета для AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 и AuНЧ-Ф-ПЭГ 2. Спектры поглощения претерпели незначительные изменения по сравнению с показателями до добавления концентрированного раствора буфера. Небольшое снижение относительной абсорбции вызвано разбавлением дисперсии наночастиц золота концентрированным фосфатно-солевым буфером. Предполагается, что поверхность наночастиц золота защищена физической адсорбцией полиэтиленгликолем, что предотвратило их контакт с другими наночастицами, даже когда наночастицы золота теряют отталкивающие поверхностные заряды из-за повышенной ионной силы в физиологических условиях, что приводит к подавлению агрегации. Относительная оптическая плотность составила: 83% для AuНЧ-Ф-ПЭГ 1 и 81% для AuНЧ-Ф-ПЭГ 2, что свидетельствует о достаточной стабильности.

Многие наночастицы разработаны для проникновения в кровотоки. Оказавшись в крови, они связываются с белками крови. Белки, адсорбирующиеся на поверхности частицы, существенно модулируют её физико-химические и биологические свойства, что в дальнейшем оказывает значительное влияние на её поведение в биологических средах организма. Эти адсорбированные белки могут формировать сложные адсорбционные слои, изменяя гидрофобность, зарядовые характеристики и поверхностную энергию частицы. В результате, такие модификации поверхности могут существенно влиять на процессы взаимодействия частицы с биологическими молекулами, клетками и внеклеточным матриксом, определяя её фармакокинетические и фармакодинамические

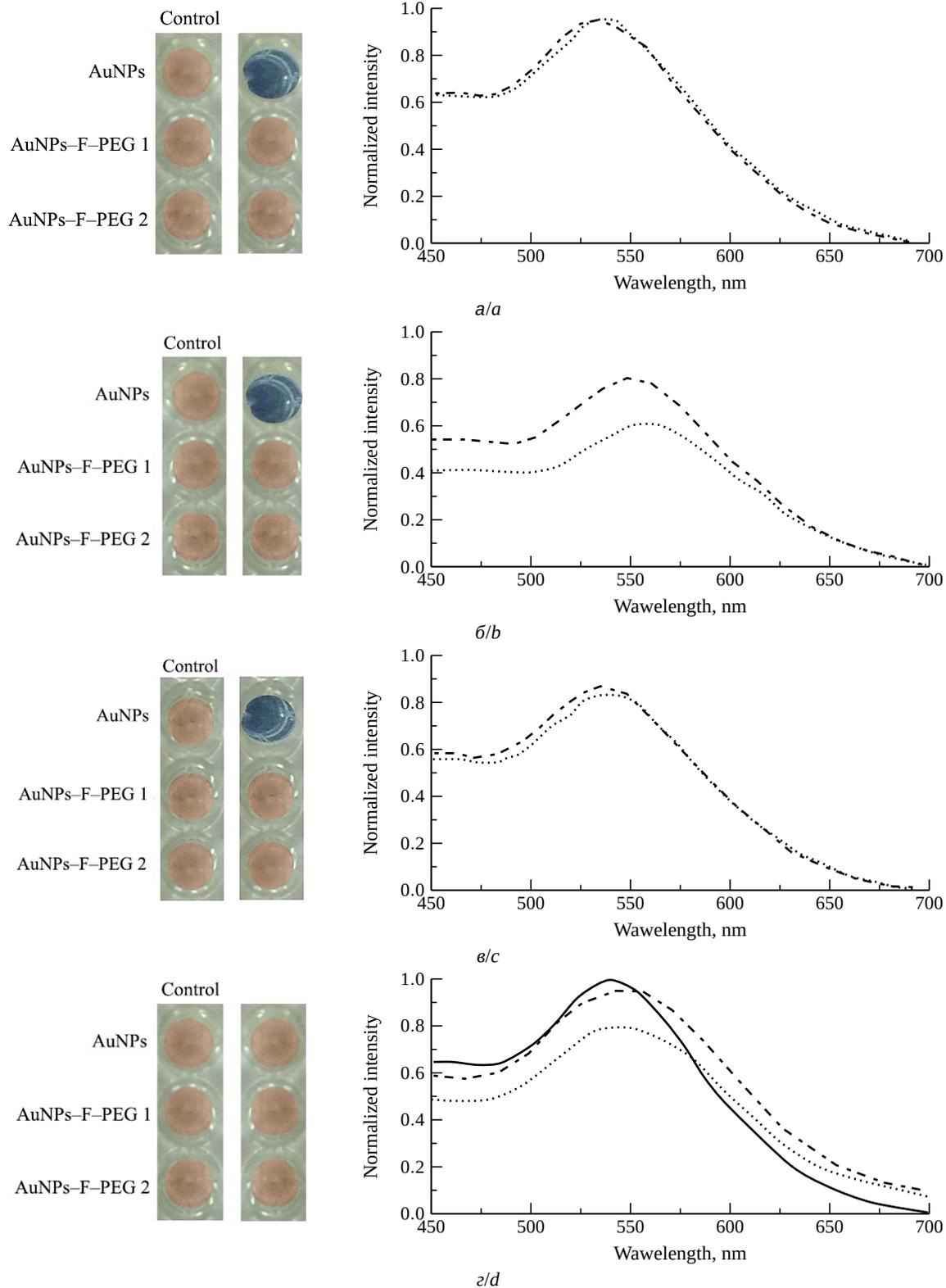


Рис. 4. Фотографии и спектры поглощения AuНЧ (сплошная линия), AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 (штрих-пунктирная линия), AuНЧ–Ф–ПЭГ 2 (точечная линия) после нагревания в течение 12 ч при 85°C (а), после замораживания в течение 12 ч при –18°C (б). После добавления десятикратно концентрированного раствора PBS, полученные дисперсии имели рН 7.4 и 150 мМ NaCl (в), после добавления раствора БСА 2 мг/мл (г) (цвет онлайн)

Fig. 4. Photographs and absorption spectra of AuNPs (solid), AuNPs–F–PEG 1 (dashed-dotted), AuNPs–F–PEG 2 (dotted) after heating for 12 h at 85°C (a), after freezing for 12 h at –18°C (b), after the addition of a tenfold-concentrated PBS solution, the resulting dispersions were pH 7.4 and 150 mM of NaCl (c), after the addition of BSA solution 2 mg/mL (d) (color online)



параметры, а также биораспределение и биоактивность.

Согласно исследованиям [43–45], процесс связывания с белками может привести к увеличению размеров наночастиц. Это обусловлено формированием агрегатов, состоящих из нескольких наночастиц с образованием белковой оболочки на поверхности данных структур. Проведенные наблюдения имеют важное значение для понимания физико-химических свойств наночастиц. По спектрам поглощения (см. рис. 4, з) видно, что происходит bathochromic shift для всех полос: для AuНЧ – на 11 нм, для AuНЧ–Ф–ПЭГ – на 1–15 нм, для AuНЧ–Ф–ПЭГ 2 – на 12 нм. ООП составила: 96% для AuНЧ–Ф–ПЭГ 1 и 80% для AuНЧ–Ф–ПЭГ 2, что подтверждает взаимодействие белка с частицами.

Выводы

В настоящем исследовании экспериментально подтверждена возможность одностадийной гидротермальной функционализации AuНЧ путём ковалентного присоединения фолатов и полиэтиленгликоля. При этом установлено, что фолиевая кислота выполняет функцию обязательного молекулярного линкера: прямая модификация поверхности AuНЧ полиэтиленгликолем в условиях гидротермального синтеза невозможна из-за отсутствия эффективных механизмов связывания ПЭГ с поверхностью золота без предварительного введения фолатов. Изучено влияние длины ПЭГ и количества аминогрупп на оптические свойства (изменения оптической плотности, вида спектра флуоресценции) синтезированных структур. Модифицированные AuНЧ могут быть использованы для селективной интернализации в опухолевые клетки. Будущие исследования будут сосредоточены на определении стабильности и целевой направленности этих конъюгатов *in vivo*. Эти результаты будут важным этапом для следующих исследований по визуализации раковых клеток, абляции опухолей и доставке лекарств.

Список литературы / References

- Schmid G., ed. *Clusters and colloids: From theory to applications*. Weinheim, VCH, 1994. 570 p. <https://doi.org/10.1002/9783527616077>
- Dykman L. A., Bogatyrev V. A., Shchegolev S. Yu., Khlebtsov N. G. *Zolotyye nanochastitsy: sintez. svoystva. biomeditsinskoye primeneniye* [Gold nanoparticles: Synthesis, properties, biomedical applications]. Moscow, Nauka, 2008. 318 p. (in Russian).
- Burda C., Chen X., Narayanan R., El-Sayed M. A. Chemistry and properties of nanocrystals of different shapes. *Chem. Rev.*, 2005, vol. 105, iss. 4, pp. 1025–1102. <https://doi.org/10.1021/cr030063a>
- Daniel M. C., Astruc D. Gold nanoparticles: Assembly, supramolecular chemistry, quantum-size-related properties, and applications toward biology, catalysis, and nanotechnology. *Chem. Rev.*, 2004, vol. 104, iss. 1, pp. 293–346. <https://doi.org/10.1021/cr030698+>
- Homola J. Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological. *Chem. Rev.*, 2008, vol. 108, iss. 2, pp. 462–493. <https://doi.org/10.1021/cr068107d>
- Njoki P. N., Lim I. I. S., Mott D., Park H. Y., Khan B., Mishra S., Sujakumar R., Luo J., Zhong C. Size correlation of optical and spectroscopic properties for gold nanoparticles. *J. Phys. Chem. C*, 2007, vol. 111, iss. 40, pp. 14664–14669. <https://doi.org/10.1021/jp074902z>
- Frens G. Controlled nucleation for the regulation of the particle size in monodisperse gold suspensions. *Nat. Phys. Sci.*, 1973, vol. 241, iss. 105, pp. 20–22. <https://doi.org/10.1038/physci241020a0>
- Turkevich J., Stevenson P. C., Hillier J. A study of the nucleation and growth processes in the synthesis of colloidal gold. *Discussions of the Faraday Society*, 1951, vol. 11, pp. 55–75. <https://doi.org/10.1039/DF9511100055>
- Kubo R. Electronic properties of metallic fine particles. I. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1962, vol. 17, no. 6, pp. 975–986. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.17.975>
- Chen H., Kou X., Yang Z., Ni W., Wang J. Shape- and size-dependent refractive index sensitivity of gold nanoparticles. *Langmuir*, 2008, vol. 24, iss. 10, pp. 5233–5237. <https://doi.org/10.1021/la800305j>
- Link S., El-Sayed M. A. Size and temperature dependence of the plasmon absorption of colloidal gold nanoparticles. *J. Phys. Chem B*, 1999, vol. 103, iss. 21, pp. 4212–4217. <https://doi.org/10.1021/jp984796o>
- Mandal S. Synthesis of radioactive gold nanoparticle in surfactant medium. *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 2014, vol. 299, pp. 1209–1212. <https://doi.org/10.1007/s10967-013-2602-z>
- Porta F., Rossi M. Gold nanostructured materials for the selective liquid phase catalytic oxidation. *J. Mol. Catal. A Chem.*, 2003, vol. 204, pp. 553–559. [https://doi.org/10.1016/S1381-1169\(03\)00338-8](https://doi.org/10.1016/S1381-1169(03)00338-8)
- Nakanishi M., Takatani H., Kobayashi Y., Hori F., Taniguchi R., Iwase A., Oshima R. Characterization of binary gold/platinum nanoparticles prepared by sonochemistry technique. *Appl Surf Sci.*, 2005, vol. 241, iss. 1–2, pp. 209–212. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2004.09.046>
- Yu Y. Y., Chang S. S., Lee C. L., Wang C. R. Gold nanorods: Electrochemical synthesis and optical properties. *J. Phys Chem B*, 1997, vol. 101, iss. 34, pp. 6661–6664. <https://doi.org/10.1021/jp971656q>
- Siti R. M., Khairunisak A. R., Aziz A. A., Noordin R. Green synthesis of 10 nm gold nanoparticles via seeded-growth method and its conjugation properties on lateral flow immunoassay. *Adv. Mater. Res.*, 2013, vol. 686,



- pp. 8–12. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.686.8>
17. Kurapov P. B., Bakhtenko E. Yu. Gold nanoparticles in the diagnosis and treatment of cancer. *Bulletin of RSMU*, 2018, vol. 6, pp. 79–85. (in Russian). <https://doi.org/10.24075/vrgmu.2018.090>
18. Brust M., Walker M., Bethell D., Schiffrin D. J., Whyman R. Synthesis of thiol-derivatised gold nanoparticles in a two-phase liquid–liquid system. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1994, vol. 7, pp. 801–802. <https://doi.org/10.1039/C39940000801>
19. Anniebell S., Gopinath S. C. B. Polymer conjugated gold nanoparticles in biomedical applications. *Curr. Med. Chem.*, 2018, vol. 25, iss. 12, pp. 1433–1445. <https://doi.org/10.2174/0929867324666170116123633>
20. Shah M., Badwaik V. D., Dakshinamurthy R. Biological applications of gold nanoparticles. *JNN*, 2014, vol. 14, iss. 1, pp. 344–362. <https://doi.org/10.1166/jnn.2014.8900>
21. Albayati A. M. K., Munef R. A., Alhaddad R. M. S. Shape and size effect of surface plasmons on gold nanoparticles. *Sys. Rev. Pharm.*, 2020, vol. 11, iss. 11. <https://doi.org/10.31838/srp.2020.11.73>
22. Mahato K., Nagpal S., Shah M. A., Srivastava A., Maurya P. K., Roy S., Chandra P. Gold nanoparticle surface engineering strategies and their applications in biomedicine and diagnostics. *3 Biotech*, 2019, vol. 9, art. 57. <https://doi.org/10.1007/s13205-019-1577-z>
23. Yeh Y. C., Creran B., Rotello V. M. Gold nanoparticles: Preparation, properties, and applications in bionanotechnology. *Nanoscale*, 2012, vol. 4, iss. 6, pp. 1871–1880. <https://doi.org/10.1039/C1NR11188D>
24. Abdipour H., Abbasi F., Nasiri M., Ghamkhari A., Ghorbani M. Multifunctional microbubbles comprising poly (lactic-co-glycolic acid), chitosan, polyethylene glycol, and folic acid for targeted cancer therapy. *J. Drug Deliv. Sci. Technol.*, 2024, vol. 94, art. 105469. <https://doi.org/10.1016/j.jddst.2024.105469>
25. Movileanu C., Anghelache M., Turtoi M., Voicu G., Neacsu I. A., Ficai D., Andronescu E., Calin M. Folic acid-decorated PEGylated magnetite nanoparticles as efficient drug carriers to tumor cells overexpressing folic acid receptor. *Int. J. Pharm.*, 2022, vol. 625, art. 122064. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2022.122064>
26. Li Z., Liu Y., Huang X., Hu C., Wang H., Yuan L., Brash J. L., Chen H. One-step preparation of gold nanovectors using folate modified polyethylenimine and their use in target-specific gene transfection. *Colloids Surf. B: Biointerfaces*, 2019, vol. 177, pp. 306–312. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2019.02.011>
27. Ghafari Y., Asefnejad A., Ogbemudia D. O. Gold nanoparticles in biomedicine: Advancements in cancer therapy, drug delivery, diagnostics, and tissue regeneration. *Scientific Hypotheses*, 2024, vol. 1, pp. 21–35. <https://doi.org/10.69530/ajtf7w89>
28. Thambiraj S., Vijayalakshmi R., Ravi Shankaran D. An effective strategy for development of docetaxel encapsulated gold nanoformulations for treatment of prostate cancer. *Sci. Rep.*, 2021, vol. 11, iss. 1, art. 2808. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-80529-1>
29. Rai A., Prabhune A., Perry C. C. Antibiotic mediated synthesis of gold nanoparticles with potent antimicrobial activity and their application in antimicrobial coatings. *J. Mater. Chem.*, 2010, vol. 20, art. 6789. <https://doi.org/10.1039/c0jm00817f>
30. Suk J. S., Xu Q., Kim N., Hanes J., Ensign L. M. PEGylation as a strategy for improving nanoparticle-based drug and gene delivery. *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 2016, vol. 99, pp. 28–51. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2015.09.012>
31. Truswell A. S. ABC of nutrition. Nutrition for pregnancy. *British Medical Journal (Clinical Research Ed.)*, 1985, vol. 291, iss. 6490, art. 263. <https://doi.org/10.1136/bmj.291.6490.263>
32. Kimling J., Maier M., Okenve B., Kotaidis V., Ballot H., Plech A. Turkevich method for gold nanoparticle synthesis revisited. *J. Phys. Chem. B*, 2006, vol. 110, iss. 32, pp. 15700–15707. <https://doi.org/10.1021/jp061667w>
33. Zhang Z., Jia J., Lai Y., Ma Y., Weng J., Sun L. Conjugating folic acid to gold nanoparticles through glutathione for targeting and detecting cancer cells. *Bioorg. Med. Chem.*, 2010, vol. 18, iss. 15, pp. 5528–5534. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2010.06.045>
34. Cheng W., Nie J., Xu L., Liang C., Peng Y., Liu G., Wang T., Mei L., Huang L., Zeng X. pH-sensitive delivery vehicle based on folic acid-conjugated polydopamine-modified mesoporous silica nanoparticles for targeted cancer therapy. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017, vol. 9, pp. 18462–18473. <https://doi.org/10.1021/acsami.7b02457>
35. Jihad M. A., Noori F. T., Jabir M. S., Albukhaty S., AlMalki F. A., Alyamani A. A. Polyethylene glycol functionalized graphene oxide nanoparticles loaded with nigella sativa extract: A smart antibacterial therapeutic drug delivery system. *Molecules*, 2021, vol. 26, iss. 11, art. 3067. <https://doi.org/10.3390/molecules26113067>
36. Bhattacharya R., Patra C. R., Earl A., Wang S., Katarya A., Lu L., Kizhakkedathu J. N., Yaszemski M. J., Greipp P. R., Mukhopadhyay D., Mukherjee P. Attaching folic acid on gold nanoparticles using noncovalent interaction via different polyethylene glycol backbones and targeting of cancer cells. *Nanomed.: Nanotechnol. Biol. Med.*, 2007, vol. 3, iss. 3, pp. 224–238. <https://doi.org/10.1016/j.nano.2007.07.001>
37. Vostrikova A. M., Kokorina A. A., Mitrophanova A. N., Sindeeva O. A., Tarakina N. V., Sapelkin A. V., Sukhorukov G. B., Goryacheva I. Y. One step hydrothermal functionalization of gold nanoparticles with folic acid. *Coll. Surf. B*, 2019, vol. 181, pp. 533–538. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2019.05.072>
38. Mordovina E. A., Tsyupka D. V., Bakal A. A., Abramova A. M., Goryacheva I. Yu. Fluorescent nanostructures based on folic acid and citrate: Synthesis and properties. *Izvestiya Saratov University. Physics*, 2021, vol. 21, iss. 3, pp. 285–292 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-3-285-292>
39. Thiele H., Hoppe K., Moll G. Über das kolloide Gold: Schutzwirkung von Polyelektrolyten. *Kolloid-Zeitschrift und Zeitschrift für Polymere*, 1962, Bd. 185, S. 45–52. <https://doi.org/10.1007/BF01882348>



40. Dykman L. A., Bogatyrev V. A. Gold nanoparticles: Preparation, functionalisation and applications in biochemistry and immunochemistry. *Russ. Chem. Rev.*, 2007, vol. 76, iss. 2, pp. 181–194. <https://doi.org/10.1070/RC2007v076n02ABEH003673>
41. Myachina G. F., Kon'Kova T. V., Korzhova S. A., Ermakova T. G., Pozdnyakov A. S., Sukhov B. G., Trofimov B. A. Gold nanoparticles stabilized with water-soluble biocompatible poly (1-vinyl-1, 2, 4-triazole). *Doklady Chemistry*, 2010, vol. 431, pp. 63–64. <https://doi.org/10.1134/S0012500810030018>
42. Alshanberi A. M., Satar R., Ansari S. A. Stabilization of β -galactosidase on modified gold nanoparticles: A preliminary biochemical study to obtain lactose-free dairy products for lactose-intolerant individuals. *Molecules*, 2021, vol. 26, iss. 5, art. 1226. <https://doi.org/10.3390/molecules26051226>
43. Khlebtsov N. G., Bogatyrev V. A., Dykman L. A., Melnikov A. G. Spectral extinction of colloidal gold and its biospecific conjugates. *J. Coll. Interface Sci.*, 1996, vol. 180, pp. 436–445. <https://doi.org/10.1006/jcis.1996.0323>
44. Bogatyrev V. A., Dykman L. A., Krasnov Y. M., Plotnikov V. K., Khlebtsov N. G. Differential light scattering spectroscopy for studying biospecific assembling of gold nanoparticles with protein or oligonucleotide probes. *Col. J.*, 2002, vol. 64, pp. 671–680. <https://doi.org/10.1023/A:1021585702894>
45. Khlebtsov N. G., Bogatyrev V. A., Khlebtsov B. N., Dykman L. A., Englebienne P. A multilayer model for gold nanoparticle bioconjugates: Application to study of gelatin and human IgG adsorption using extinction and light scattering spectra and the dynamic light scattering method. *Col. J.*, 2003, vol. 65, pp. 622–635. <https://doi.org/10.1023/A:1026140310601>

Поступила в редакцию 08.05.2025; одобрена после рецензирования 23.09.2025; принята к публикации 10.10.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 08.05.2025; approved after reviewing 23.09.2025; accepted for publication 10.10.2025; published 31.03.2026



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 84–92

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 84–92

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-84-92>, EDN: SADIBL

Научная статья
УДК 538.9



Многостенные углеродные нанотрубки с индексами хиральности стенок ($m, 2m$): упругие и электропроводные свойства

О. Е. Глухова^{1,3}, А. Ю. Герасименко^{2,3}, М. М. Слепченков¹✉

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

²Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», Россия, 124498, г. Москва, Зеленоград, площадь Шокина, д. 1

³Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Россия, 119991, г. Москва, ул. Большая Пироговская, д. 2, стр. 4

Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, ¹заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики; ³ведущий научный сотрудник лаборатории биомедицинских нанотехнологий, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028
Герасименко Александр Юрьевич, доктор технических наук, ²профессор Института биомедицинских систем; ³заведующий лабораторией биомедицинских нанотехнологий, gerasimenko@bms.zone, <https://orcid.org/0000-0001-6514-2411>, AuthorID: 605086
Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, slepchenkovm@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4282-5620>, AuthorID: 712909

Аннотация. Многостенные углеродные нанотрубки, характеризующиеся большой удельной площадью поверхности, превосходной адсорбционной способностью, высокими показателями прочности на разрыв, тепло- и электропроводности, находят применение в наноэлектронике, энергетике, катализе, сенсорике, а также в различных биомедицинских приложениях. В данной работе рассматривается новая конфигурация многостенных углеродных нанотрубок с разным количеством стенок – с индексами хиральности ($m, 2m$) с шагом по числу m , равным 3, обеспечивающим ван-дер-ваальсовое межстенное расстояние ~ 3.4 Å и одинаковый шаг трансляции 11.35 Å по оси многостенной нанотрубки. Исходными данными для построения атомистических моделей послужили результаты проведенного натурного эксперимента по синтезу массивов многостенных углеродных нанотрубок методом плазменного химического осаждения паров из газовой фазы. Все теоретические исследования проводились с применением метода функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованием заряда. Показано, что при однородной упругой деформации растяжения подобных многостенных нанотрубок, стенки которых имеют одинаковый угол хиральности, наблюдается незначительное (в пределах нескольких сотых долей терапаскаля) увеличение модуля Юнга с изменением количества стенок от 1 до 8. При этом с ростом диаметра внутреннего канала от 2 до 6 нм происходит увеличение модуля Юнга от 1.7 до 2.2 ТПа. Установлен убывающий характер сопротивления нанотрубок с увеличением числа стенок и выходом его на насыщение вблизи значения 1 кОм при 8 стенках. Полученные результаты открывают широкие перспективы применения многостенных углеродных нанотрубок со стенками типа ($m, 2m$) (шаг изменения m равен 3) в устройствах гибкой и растяжимой электроники.

Ключевые слова: многостенные углеродные нанотрубки, хиральность, модуль Юнга, электрическое сопротивление

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-29-00963, <https://rscf.ru/project/25-29-00963/>).

Для цитирования: Глухова О. Е., Герасименко А. Ю., Слепченков М. М. Многостенные углеродные нанотрубки с индексами хиральности стенок ($m, 2m$): упругие и электропроводные свойства // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 84–92. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-84-92>, EDN: SADIBL

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

Article

Multi-walled carbon nanotubes with wall chirality indices ($m, 2m$): Elastic and electrically conductive properties

О. Е. Glukhova^{1,3}, А. Yu. Gerasimenko^{2,3}, М. М. Slepchenkov¹✉

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

²National Research University "Moscow Institute of Electronic Technology", 1 Shokin Square, Zelenograd, Moscow 124498, Russia

³I. M. Sechenov First Moscow State Medical University, 2–4 Bolshaya Pirogovskaya St., Moscow 119991, Russia



Olga E. Glukhova, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028

Alexander Yu. Gerasimenko, gerasimenko@bms.zone, <https://orcid.org/0000-0001-6514-2411>, AuthorID: 605086

Mikhail M. Slepchenkov, slepchenkovm@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4282-5620>, AuthorID: 712909

Abstract. Background and Objectives: Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs), characterized by a large specific surface area, excellent adsorption capacity, high tensile strength, thermal and electrical conductivity, find application in nanoelectronics, energy, catalysis, sensorics, and various biomedical applications. This paper considers a new MWCNT configuration with different number of walls with chirality indices ($m, 2m$) and an m -increment of 3, providing a van der Waals interwall spacing of ~ 3.4 Å and a uniform translation step of 11.35 Å along the MWCNT axis. **Materials and Methods:** The initial data for constructing the atomistic models were the results of a full-scale experiment on the synthesis of MWCNT arrays by plasma-enhanced chemical vapor deposition. All theoretical studies were performed using the density functional theory method in the tight-binding approximation with self-consistent charge. **Results:** It has been shown that, under uniform elastic tensile strain, such MWCNTs with walls having the same chirality angle exhibit a slight (within a few hundredths of a terapascal) increase in Young's modulus with a change in the number of walls from 1 to 8. Furthermore, with an increase in the inner channel diameter from 2 to 6 nm, Young's modulus increases from 1.7 to 2.2 TPa. A decreasing resistance pattern has been established for the MWCNTs with an increasing number of walls, reaching saturation near 1 kΩm at 8 walls. **Conclusion:** These results open up broad prospects for the application of MWCNTs with ($m, 2m$) walls (the m -increment is "3") in flexible and stretchable electronic devices.

Keywords: Young's modulus, electrical resistance, multi-walled carbon nanotubes, chirality

Acknowledgments: The work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 25-29-00963, <https://rscf.ru/project/25-29-00963/>).

For citation: Glukhova O. E., Gerasimenko A. Yu., Slepchenkov M. M. Multi-walled carbon nanotubes with wall chirality indices ($m, 2m$): Elastic and electrically conductive properties. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 84–92 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-84-92>, EDN: SADIBL

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

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) занимают лидирующие позиции на рынке материалов с момента публикации С. Ииджимы в 1991 году [1]. Инженеры и ученые успешно работают и с одностенными УНТ (ОУНТ), и с многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ), характеризующимися уникальными физико-химическими и механическими свойствами [2, 3]. В то же время МУНТ имеют ряд конкурентных преимуществ над ОУНТ, главным из которых является возможность их синтезировать в больших объемах, что обуславливает более высокий уровень коммерциализации МУНТ [4]. Отличительными признаками МУНТ являются большая удельная площадь поверхности, высокие значения прочности на разрыв (до 90 ГПа), модуля упругости (не менее 1 ТПа), тепло- и электропроводности, превосходная адсорбционная способность и улучшенные оптические свойства [5, 6]. Структурно МУНТ представляют собой коаксиально вложенные друг в друга ОУНТ, слабо связанные вместе силами Ван-дер-Ваальса, с внешним диаметром от 2 до 100 нм [6]. Имея вышеперечисленные структурные особенности и свойства, МУНТ находят широкий спектр областей применения, в том числе в нанoeлектронике, энергетике, катализе, сенсорике, различных биомедицинских приложениях [7–9]. Благодаря постоянному совершенствованию технологий синтеза в настоящее время можно получать структуры

МУНТ, содержащие различное количество стенок: от совсем небольшого (2–5) [10] до 100 и более [11]. И те, и другие разновидности МУНТ изучаются методами компьютерного моделирования для установления взаимосвязи «структура-свойства». Структуры МУНТ с числом стенок от 2 до 5 исследуются преимущественного методами атомистического моделирования [12, 13]. МУНТ с числом стенок от 10 и более изучаются методами конечно-элементного моделирования, базирующимися на приближениях сплошной среды [14].

В последние несколько лет технологам удалось добиться существенных успехов в области синтеза ОУНТ с контролируемым распределением хиральности. На основе данных многочисленных экспериментов по синтезу ОУНТ и результатов DFT-исследований была разработана теория винтовой дислокации, определяющей кинетику роста ОУНТ на твердых катализаторах [15]. Согласно разработанной теории, хиральные ОУНТ типа ($2n, n$), имеющие угол хиральности 19.1° , растут быстрее всего на твердой поверхности катализатора, а, значит, должны преобладать в конечном продукте синтеза УНТ. При этом следует отметить, что при описании теории и обосновании её результатов авторы рассматривают в основном полупроводниковые трубки. При построении геометрических моделей МУНТ, как правило, ограничиваются рассмотрением либо зигзагообразных, либо кресельных УНТ, причём в исследованиях и методами атомистического



моделирования [13, 16], и методами сплошной среды [14]. В тоже время большинство синтезируемых УНТ являются именно хиральными трубками с $n \neq m$ [17]. В данной работе рассматриваются МУНТ с хиральностью стенок типа $(m, 2m)$ с шагом изменения числа m , равным 3. Целью исследования является выявление закономерностей поведения упругих и электропроводных свойств таких МУНТ с изменением числа стенок.

1. Материалы и методы

1.1. Вычислительные подходы

Все теоретические исследования проводились с применением метода SCC DFTB [18], который обеспечивает высокую точность расчётов энергетических и электронных характеристик на фоне использования многоатомных суперъячеек. Дисперсионное взаимодействие между трубками в составе МУНТ учитывалось с помощью потенциала Леннард-Джонса [19]. Для получения энергетически выгодной атомной конфигурации суперъячеек проводилась минимизация полной энергии по всем координатам всех атомов и по длинам векторов трансляции суперъячейки при электронной температуре 300 К. Применялись периодические граничные условия во всех трёх пространственных направлениях. Размер моделируемой системы в направлении оси Z определялся величиной вектора трансляции суперъячейки вдоль оси УНТ, а в направлениях двух других осей он составлял 100 нм. Для минимизации полной энергии использовался метод сопряжённых градиентов. Условием достижения минимума полной энергии выступала величина силы, действующей на атом: её значение не должно было превышать 10^{-4} эВ/атом.

Модуль Юнга Y суперъячеек МУНТ рассчитывался по формуле, вытекающей из закона Гука [22]:

$$Y = \frac{2\Delta E_{tot}}{\Delta V} \frac{l}{\Delta l}, \quad (1)$$

где ΔE_{tot} – изменение полной энергии структуры при растяжении, ΔV – изменение объёма структуры при растяжении, l – длина суперъячейки, определяемая длиной вектора трансляции, Δl – удлинение вектора трансляции при растяжении.

Оценка электропроводных свойств проводилась в рамках формализма Ландауэра – Буттикера и метода неравновесных функций Грина [20]. На рис. 1 показана система из двух электродов

и проводящего канала (устройства), используемая для расчёта квантового транспорта электронов.

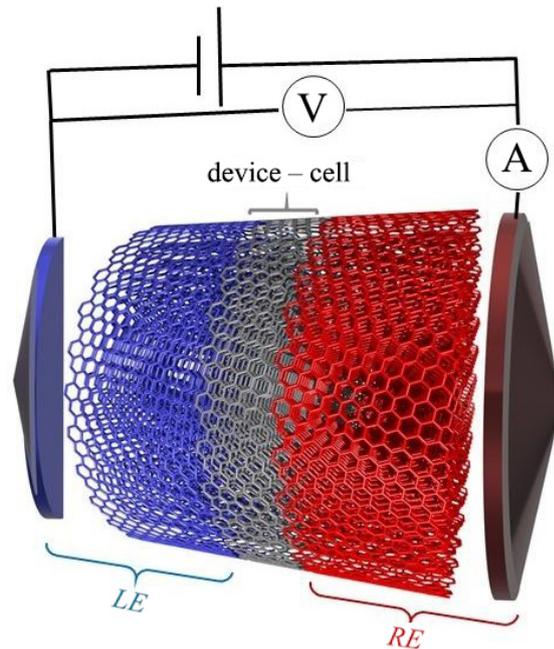


Рис. 1. Схема устройства и системы электродов (LE – левый электрод, RE – правый электрод) для расчёта электропроводности МУНТ с трубками $(m, 2m)$ (цвет онлайн)

Fig. 1. Diagram of the device and the electrode system (LE – left electrode, RE – right electrode) for calculating the electrical conductivity of MWCNTs with tubes $(m, 2m)$ (color online)

Расчёт электропроводности G проводился по формуле:

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - E_F) dE, \quad (2)$$

где e^2/h – квант проводимости (e – заряд электрона, h – постоянная Планка), $T(E)$ – усреднённая функция пропускания электронов (E – энергия), F_T – функция теплового уширения энергетических уровней, E_F – уровень Ферми электродов. Электрическое сопротивление R – величина, обратная электропроводности G . Функция пропускания электронов $T(E)$ определяется выражением вида

$$T(E) = Tr(\Gamma_S(E) G_C^A(E) \Gamma_D(E) G_C^R(E)), \quad (3)$$

где $G_C^A(E)$ и $G_C^R(E)$ – опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие взаимодействие моделируемой системы с электродами, а $\Gamma_S(E)$ и $\Gamma_D(E)$ – матрицы уширения энергетических уровней электродов истока и стока. Расчёты проводились для температуры 300 К.



1.2. Синтез МУНТ

Массивы МУНТ были синтезированы методом плазменного химического осаждения паров из газовой фазы [21]. В качестве исходных подложек использовались сильно легированные монокристаллические кремниевые пластины с проводимостью электронного типа. Изначально на подложку наносилась каталитическая пара металлов, Ti (10 нм) и Ni (2 нм), обработанная в растворе Пиранья путем испарения электронным пучком. Далее были проведены стадии окислительного и восстановительного отжига для образования наночастиц катализатора на подложке. Синтез МУНТ проводился с использованием системы Oxford PlasmaLab System 100 (Oxford Instruments, Великобритания).

Для синтеза массивов нанотрубок проводились следующие процессы. Осуществлялось окисление при 280°C в течение 5 мин в среде газов O₂ и Ar с обработкой радиочастотным источником плазмы с мощностью 100 Вт. Восстановление при 700°C в течение 5 мин в среде газов NH₃ и Ar с обработкой радиочастотным источником плазмы с мощностью 100 Вт. Средний диаметр нанотрубок в массивах двух образцов определялся в основном размером сформированных наночастиц катализатора на подложке. Высота массивов МУНТ составляла ~8 мкм. Процесс вертикального роста нанотрубок объясняется эффектом конденсации от соседних УНТ (эффект сгущения), т. е. удержанием нанотрубок силами Ван-дер-Ваальса в массиве с высокой плотностью трубок во время их роста. Синтезированные образцы МУНТ с восьмью стенками (толщина стенок составляет 3.6–4.1 нм) имели диаметр внутреннего канала 2–6 нм и внешний диаметр 11–13 нм. На рис. 2 показаны изображения сканирующей электронной микроскопии

(СЭМ) (рис. 2, а, б) массивов МУНТ и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) (рис. 2, в) отдельных МУНТ из массива с диаметром внутреннего канала ~5 нм.

2. Особенности атомного строения хиральных МУНТ

Для построения суперъячеек хиральных МУНТ с различным количеством стенок типа ($m, 2m$) использовался оригинальный подход [22], позволяющий генерировать атомные сетки МУНТ с любыми диаметром внутреннего канала и обеспечивающий межстенное расстояние ~3.4 Å. При построении моделей МУНТ учитывались топологические особенности индивидуальных нанотрубок с индексами хиральности ($m, 2m$), которые характеризуются одинаковым углом хиральности $\theta = 19.1^\circ$ и одинаковым вектором трансляции $T_c = 11.35 \pm \pm 0.005$ Å. Структура атомной сетки таких хиральных трубок отличается следующими особенностями:

- 1) m атомов лежат на одной окружности. На рис. 3, а показана суперъячейка ОУНТ (19, 38). В верхней части для удобства 19 атомов, расположенных на одной окружности, отмечены одинаковым цветом.
- 2) Окружности с идентичными атомами расположены нерегулярно вдоль оси. На рис. 3, б показано, что атомная сетка образована одинаковыми парами атомов (как и сетка графена), выделенными зелёным и голубым цветами в каждой паре. Расстояние между окружностями с идентичными атомами h_1 определяется с помощью угла хиральности θ и расстояния между этими атомами d_0 (малая диагональ гексагона) как

$$h_1 = \sqrt{3}d_0 \sin(\theta). \quad (4)$$

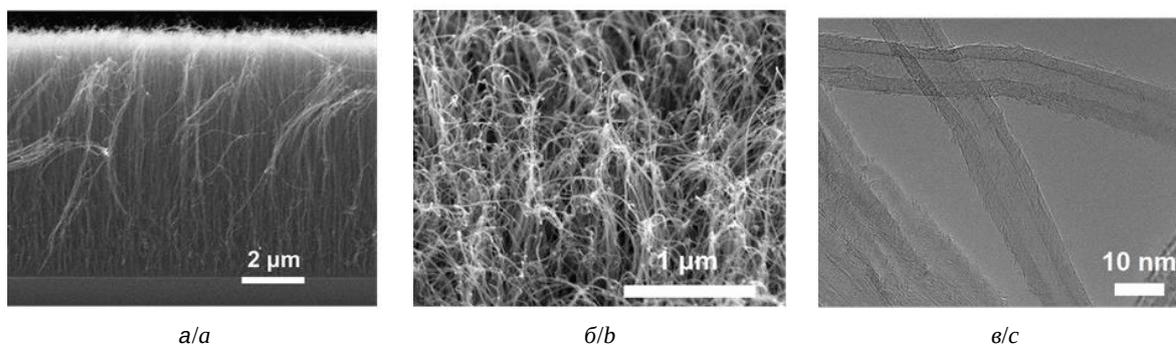


Рис. 2. Изображения СЭМ (а, б) и ПЭМ (в) массивов МУНТ на кремниевой подложке
 Fig. 2. SEM (a, b) and TEM (c) images of MWCNT arrays on a silicon substrate

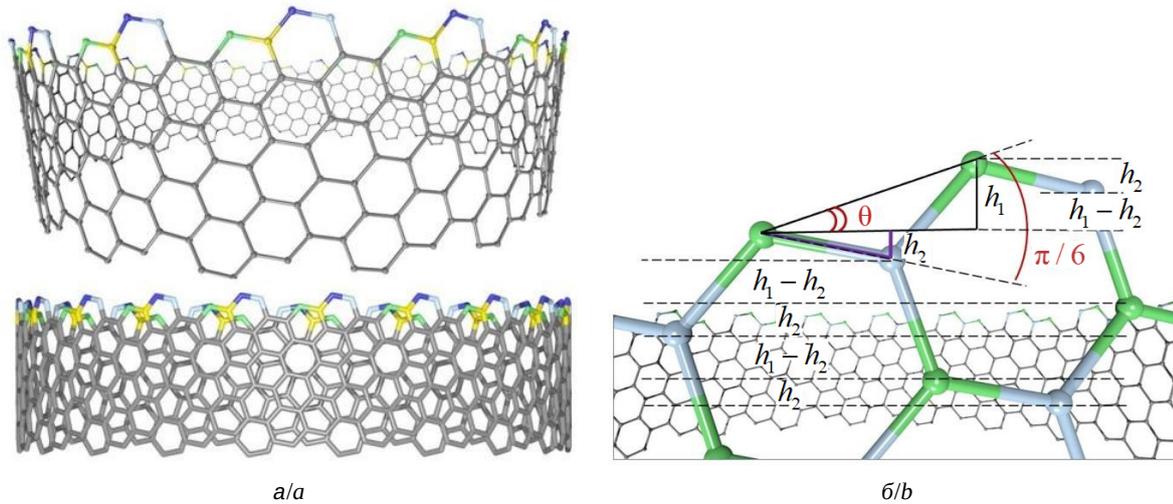


Рис. 3. Суперячейка ОУНТ (19, 38) (а) и её фрагмент с расстояниями h_1 между окружностями с идентичными атомами (выделены в каждой паре зелёным и голубым цветами) и h_2 между окружностями с неидентичными атомами (б) (цвет онлайн)

Fig. 3. Supercell of SWCNT (19, 38) (a) and its fragment with distances h_1 between circles with identical atoms (highlighted in each pair in green and blue) and h_2 between circles with non-identical atoms (b) (color online)

Промежуток h_2 между окружностями с неидентичными атомами определяется другим углом ($30^\circ - \theta$) и длиной С–С связи как

$$h_2 = d_0 \sin(30^\circ - \theta). \quad (5)$$

Таким образом, как показано на рис. 3, б, окружности с идентичными атомами чередуются вдоль оси трубки с шагом h_2 и шагом $h_1 - h_2$.

3) Количество окружностей N_{ring} с идентичными атомами определяется отношением длины вектора трансляции к величине h_1 , но поскольку таких атомов пара, то необходимо удвоение:

$$\begin{aligned} \frac{N_{ring}}{2} &= \frac{T_c}{h_1} = \frac{3\sqrt{7}d_0}{\sqrt{3d_0} \sin(\theta)} = \\ &= \frac{3\sqrt{7}d_0}{\sqrt{3d_0} \sqrt{3/28}} = 14. \end{aligned} \quad (6)$$

Для всех трубок ($m, 2m$) количество окружностей одинаково $N_{ring} = 28$, соответственно количество атомов в супер-ячейке определяется как $N_{atom} = 28m$;

4) Шаг параметра m для трубок в составе МУНТ составляет 3.

Используя подход, подробно описанный в работе [22], и данные натурального эксперимента по синтезу массивов МУНТ, приведенные в п. 1.2, были построены атомистические модели МУНТ с различным количеством стенок и различными значениями диаметра внутреннего

канала. Всего были построены 32 кристаллических супер-ячейки МУНТ с количеством стенок от 1 до 8 и диаметром внутреннего канала 2, 4, 5 и 6 нм. Символически состав МУНТ можно записать как

$$\sum_{i=0}^n ((m + 3i), (2m + 6i)), \quad (7)$$

где m – индекс хиральности ОУНТ с диаметром, соответствующим внутреннему каналу МУНТ, а n – количество последующих стенок. Шаг индекса хиральности m для соседних стенок равен 3, поскольку разность между величинами диаметров при этом будет $\frac{\sqrt{21}d_{03}}{\pi}$, что соответствует ~ 6.3 Å – практически удвоенному значению ван-дер-ваальсовому расстоянию между стенками. На рис. 4 в качестве примера показана атомистическая модель МУНТ с восемью стенками и диаметром внутреннего канала ~ 5 нм. Для нее $m = 24$, поэтому МУНТ записывается следующим образом: (24, 48)@(27, 54)@(30, 60)@(33, 66)@(36, 72)@(39, 78)@(42, 84)@(45, 90).

3. Упругие и электропроводные свойства хиральных МУНТ

Построенные атомистические модели МУНТ, составленных из хиральных трубок ($m, 2m$), прошли проверку на прочность путём оценивания их способности оказывать сопротивление однородной деформации. С этой целью

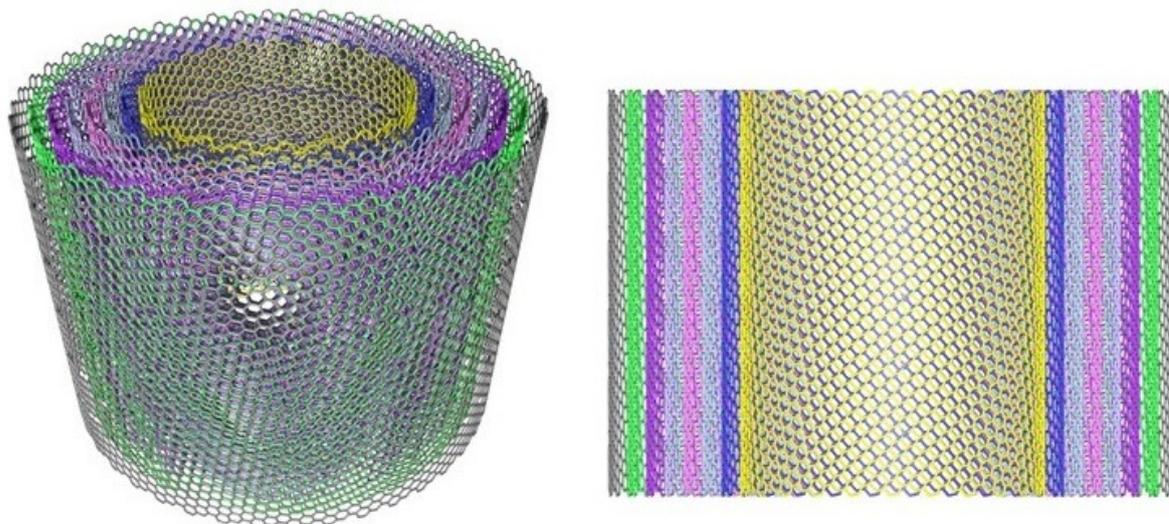


Рис. 4. Атомистическая модель МУНТ с 8 стенками с диаметром внутреннего канала ~ 5 нм, соответствующая данным изображения ПЭМ (см. рис. 1, в) (цвет онлайн)

Fig. 4. Atomistic model of MWCNT with 8 walls with an internal channel diameter of ~ 5 nm, corresponding to the TEM image data (see Fig. 1, c) (color online)

для всех построенных атомистических моделей МУНТ при растяжении на 1% был рассчитан модуль Юнга Y . Согласно полученным результатам расчёта, с увеличением количества стенок до восьми модуль Юнга меняется в небольших пределах: МУНТ с диаметрами внутреннего канала 2 ($m = 9$), 4 ($m = 19$), 5 ($m = 24$) и 6 нм ($m = 29$) характеризуются значениями 1.7 ± 0.02 , 1.8 ± 0.04 , 2.1 ± 0.03 и 2.2 ± 0.01 ТПа соответственно. Сравнение с результатами расчёта модуля Юнга МУНТ, построенных из ахиральных ОУНТ типа «zigzag» и «armchair» [14], показало, что МУНТ с типом хиральности трубок $(m, 2m)$ характеризуются лучшей способностью сопротивляться растяжению при упругой деформации. В частности, значения модуля Юнга, рассчитанного методами конечно-элементного моделирования, составляют 1.069–1.012 ТПа для МУНТ, состоящих из ОУНТ типа «zigzag», и 1.061–1.051 ТПа для МУНТ, состоящих из ОУНТ типа «armchair». Причём, с увеличением числа стенок в составе МУНТ от 5 до 20 значения модуля Юнга меняются в небольших пределах [14], что также было отмечено ранее в работе [23]. Из данных эксперимента известно, что усреднённое значение модуля Юнга индивидуальных МУНТ составляет 1.8 ТПа [24] и хорошо коррелирует с полученными нами расчётными значениями для МУНТ, состоящих из хиральных трубок $(m, 2m)$.

После оценки упругих свойств МУНТ со стенками типа $(m, 2m)$ были исследованы их электропроводные свойства. Подчеркнем, что расчёты квантового транспорта электронов для индивидуальных МУНТ, состоящих из хиральных трубок, ранее не проводились. Предпринимались попытки оценить влияние механических деформаций на электронный транспорт через МУНТ. В этом преуспел А. Pantano [25], предложивший комбинированный подход, сочетающий метод конечных элементов для создания континуальной модели УНТ и метод сильной связи для оценки электропроводности. Исследования выполнялись на примере пятистенных МУНТ, состоящих из трубок типа «armchair»: (70, 70), (65, 65), (60, 60), (55, 55) и (50, 50). Для недеформированной МУНТ величина электропроводности на уровне Ферми (смещён в 0 эВ) в квантах проводимости G_0 составила $2G_0$ (154.8 мкСм), а при осевом сжатии на 20 нм уменьшилась вдвое. Переходя к электрическому сопротивлению, имеем для недеформированной МУНТ значение 6.4 кОм, что соответствует сопротивлению идеальной металлической нанотрубки [26].

На рис. 5 показан график значений сопротивления, рассчитанных нами для МУНТ с разным числом стенок от 1 (соответствует ОУНТ $(m, 2m)$) до 8 для случая диаметра внутреннего канала ~ 2 нм ($m = 9$). Были выбраны структуры МУНТ с наименьшим значением внутреннего



диаметра среди рассмотренных ввиду высокой вычислительной сложности расчётов квантового транспорта. Из графика видно, что с увеличением числа стенок сопротивление уменьшается, причём, уже для двух- и трехстенных МУНТ наблюдается снижение сопротивления в 2 и 3 раза соответственно по сравнению с сопротивлением ОУНТ $(m, 2m)$. Начиная с четырёх стенок и выше, сопротивление плавно выходит на насыщение, приближаясь к 1 кОм. Для объяснения такого поведения сопротивления МУНТ во вставке к графику на рис. 5 приводятся кривые функции пропускания электронов $T(E)$ для каждого рассмотренного количества стенок в составе МУНТ. Уровень Ферми смещён в 0 эВ. Хорошо видно, как по мере увеличения числа стенок сужается область «плато» вблизи уровня Ферми, поднимаясь при этом вверх по оси ординат, демонстрируя рост числа каналов проводимости, доступных для транспорта электронов. Приведённые на графике $T(E)$ пунктирные прямые наглядно показывают симметричное расположение границ области «плато» относительно положения уровня Ферми при разном количестве стенок и стремление числа каналов проводимости к своему возможному максимуму, достигаемому при 8 стенках.

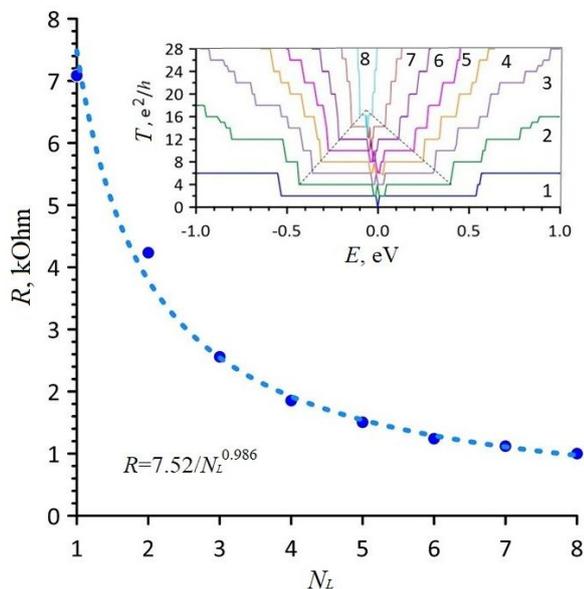


Рис. 5. Зависимость электрического сопротивления R от числа стенок N_L в МУНТ с трубками $(m, 2m)$ с шагом изменения индекса m , равным 3 (цвет онлайн)

Fig. 5. Dependence of electrical resistance R on the number of walls N_L in MWCNTs with tubes $(m, 2m)$ with a step of changing the index m equal to 3 (color online)

На основе анализа полученных результатов расчёта нами установлено, что сопротивление

МУНТ из трубок $(m, 2m)$ с шагом изменения индекса $m = 3$, с увеличением числа стенок уменьшается по закону $R_0/N_L^{0.986}$, где R_0 – это сопротивление одной нанотрубки $(m, 2m)$ (7.52 кОм). Установленное наименьшее значение сопротивления в 1 кОм, достигаемое для МУНТ с 8 стенками, превосходит на порядок значения сопротивлений МУНТ близкого диаметра, полученные в эксперименте [27, 28]. В работе [27] показано, что МУНТ с диаметром внутреннего канала 2.5–5 нм характеризуются сопротивлением 10–20 кОм, в то время как минимальное сопротивление МУНТ с диаметром 2–10 нм составляет 13 кОм [28].

С учетом упомянутых выше высоких показателей модуля Юнга можно прогнозировать широкие перспективы применения МУНТ со стенками типа $(m, 2m)$ (шаг изменения m равен 3) в устройствах гибкой и растяжимой электроники. Важно отметить, что достижение столь низких значений электрического сопротивления и высоких значений модуля Юнга должно обеспечиваться бездефектностью стенок МУНТ. Известно, что при наличии структурных дефектов в атомной сетке нанотрубок, в частности дефектов типа «вакансия», модуль Юнга [29, 30] и электропроводность [26] МУНТ уменьшаются по сравнению с показателями для бездефектных нанотрубок.

Заключение

Представлена новая конфигурация хиральных нанотрубок $(m, 2m)$ с шагом изменения индекса m , равным 3. Высокоточными квантовыми методами расчёта выявлены закономерности влияния количества стенок и диаметра внутреннего канала на модуль Юнга МУНТ, построенных из трубок $(m, 2m)$. По мере увеличения количества стенок от 1 до 8 модуль Юнга изменяется в пределах нескольких сотых долей терапаскаля, а с ростом диаметра внутреннего канала с 2 до 6 нм он возрастает с 1.8 до 2.2 ТПа. На основе результатов расчёта электрического сопротивления установлено, что для МУНТ с хиральностью стенок $(m, 2m)$ и шагом изменения числа $m = 3$, сопротивление уменьшается с ростом числа стенок по закону $R_0/N_L^{0.986}$, где R_0 – это сопротивление одной нанотрубки типа $(m, 2m)$, N_L – количество стенок в составе МУНТ. Показано, что сопротивление МУНТ с ростом числа стенок стремится к значению ~1 кОм, достигаемому при 8 стенках. Для МУНТ с 8 стенками функция $T(E)$, определяющая число доступных каналов проводимости,



достигает своего максимума на уровне Ферми, что объясняет эффект насыщения сопротивления. Полученные результаты открывают широкие возможности для применения МУНТ со стенками типа (m , $2m$) в устройствах гибкой и растяжимой электроники.

Список литературы / References

- Iijima S. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. *Nature*, 1991, vol. 354, pp. 56–58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- Hughes K. J., Iyer K. A., Bird R. E., Ivanov J., Banerjee S., Georges G., Zhou Q. A. Review of carbon nanotube research and development: Materials and emerging applications. *ACS Appl. Nano Mater.*, 2024, vol. 7, iss. 16, pp. 18695–18713. <https://doi.org/10.1021/acsanm.4c02721>
- Kurita H., Estili M., Kwon H., Miyazaki T., Zhou W., Silvain J. F., Kawasaki A. Load-bearing contribution of multi-walled carbon nanotubes on tensile response of aluminum. *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, 2015, vol. 68, pp. 133–139. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2014.09.014>
- Shoukat R., Khan M. I. Carbon nanotubes: A review on properties, synthesis methods and applications in micro and nanotechnology. *Microsyst Technol.*, 2021, vol. 27, pp. 4183–4192. <https://doi.org/10.1007/s00542-021-05211-6>
- Muradyan N. G., Gyulasaryan H., Arzumanyan A. A., Badalyan M. M., Kalantaryan M. A., Vardanyan Y. V., Laroze D., Manukyan A., Barseghyan M. G. The effect of multi-walled carbon nanotubes on the compressive strength of cement mortars. *Coatings*, 2022, vol. 12, iss. 12, art. 1933. <https://doi.org/10.3390/coatings12121933>
- Colbert D. D. T., Zhang J., McClure S. M., Nikolaev P., Chen Z., Hafner J. H., Owens D. W., Kotula P. G., Carter C. B., Weaver J. H., Rinzler A. G., Smalley R. E. Growth and sintering of fullerene nanotubes. *Science*, 1994, vol. 266, iss. 5188, pp. 1218–1222. <https://doi.org/10.1126/science.266.5188.1218>
- Syduzzaman M., Islam Saad M. S., Piam M. F., Talukdar T. A., Shobdo T. T., Pritha N. M. Carbon nanotubes: Structure, properties and applications in the aerospace industry. *Results Mater.*, 2025, vol. 25, art. 100654. <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2024.100654>
- Tao Z., Zhao Y., Wang Y., Zhang G. Recent advances in carbon nanotube technology: Bridging the gap from fundamental science to wide applications. *C*, 2024, vol. 10, iss. 3, art. 9. <https://doi.org/10.3390/c10030069>
- Dubey R., Dutta D., Sarkar A., Chattopadhyay P. Functionalized carbon nanotubes: Synthesis, properties and applications in water purification, drug delivery and material and biomedical sciences. *Nanoscale Adv.*, 2021, vol. 3, iss. 20, pp. 5722–5744. <https://doi.org/10.1039/D1NA00293G>
- Huang J. Y., Chen S., Jo S. H., Wang Z., Han D. X., Chen G., Dresselhaus M. S., Ren Z. F. Atomic-scale imaging of wall-by-wall breakdown and concurrent transport measurements in multiwall carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, vol. 94, art. 236802. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.236802>
- Masyutin A. G., Bagrov D. V., Vlasova I. I., Nikishin I. I., Klinov D. V., Sychevskaya K. A., Onishchenko G. E., Erokhina M. V. Wall thickness of industrial multi-walled carbon nanotubes is not a crucial factor for their Degradation by sodium hypochlorite. *Nanomaterials*, 2018, vol. 8, iss. 9, art. 715. <https://doi.org/10.3390/nano8090715>
- Qin C., Tian Z., Luo X., Xie Q., Nie T., Guo X. First-principles study of electronic structure of double-walled and single-walled carbon nanotubes. *Ceramics International*, 2021, vol. 47, iss. 2, pp. 2665–2671. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.09.115>
- Yamamoto G., Chen Y., Kunitomo A., Shigemitsu N., Shindo T. Decreasing vacancy-defect sensitivity in multi-walled carbon nanotubes through interwall coupling. *Carbon Trends*, 2023, vol. 11, art. 100266. <https://doi.org/10.1016/j.cartre.2023.100266>
- Sakharova N. A., Pereira A. F. G., Antunes J. M., Fernandes J. V. Mechanical characterization of multiwalled carbon nanotubes: Numerical simulation study. *Materials*, 2020, vol. 13, iss. 19, art. 4283. <https://doi.org/10.3390/ma13194283>
- Qiu L., Ding F. Understanding single-walled carbon nanotube growth for chirality controllable synthesis. *Acc. Mater. Res.*, 2021, vol. 2, iss. 9, pp. 828–841. <https://doi.org/10.1021/accountsmr.1c00111>
- Marana N. L., Noel Y., Sambrano J. R., Ribaldone C., Casassa S. *Ab initio* modeling of multiwall: A general algorithm first applied to carbon nanotubes. *J. Phys. Chem. A*, 2021, vol. 125, iss. 18, pp. 4003–4012. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c01682>
- Li M., Liu X., Zhao X., Yang F., Wang X., Li Y. Metallic catalysts for structure-controlled growth of single-walled carbon nanotubes. *Top Curr Chem.*, 2017, vol. 375, art. 29. <https://doi.org/10.1007/s41061-017-0116-9>
- Elstner M., Seifert G. Density functional tight binding. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2014, vol. 372, iss. 2011, art. 20120483. <https://doi.org/10.1098/rsta.2012.0483>
- Hamada N., Sawada Si., Oshiyama A. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, vol. 68, pp. 1579–1581. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.1579>
- Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge, Cambridge University Press, 2012. xiv+404 p. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139164313>
- Gerasimenko A. Yu., Kitsyuk E. P., Kuksin A. V., Ryazanov R. M., Savitskiy A. I., Savelyev M. S., Pavlov A. A. Influence of laser structuring and barium nitrate treatment on morphology and electrophysical characteristics of vertically aligned carbon nanotube arrays. *Diam. Relat. Mater.*, 2019, vol. 96, pp. 104–111. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.04.035>
- Glukhova O. E., Kolesnichenko P. A., Slepchenkov M. M. Mechanical properties of multi-walled carbon chiral nanotubes and their bundles: *In silico* studies within the density functional theory approach in



- the tight-binding approximation. *Physics of the Solid State*, 2025, vol. 67, iss. 5, pp. 897–903 (in Russian). <https://doi.org/10.61011/FTT.2025.05.60756.105-25>
23. Ghavamian A., Rahmandoust M., Öchsner A. A numerical evaluation of the influence of defects on the elastic modulus of single and multi-walled carbon nanotubes. *Comput. Mater. Sci.*, 2012, vol. 62, pp. 110–116. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.05.003>
24. Treacy M., Ebbesen T., Gibson J. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *Nature*, 1996, vol. 381, pp. 678–680. <https://doi.org/10.1038/381678a0>
25. Pantano A. Effects of mechanical deformation on electronic transport through multiwall carbon nanotubes. *Int. J. Solids Struct.*, 2017, vol. 122–123, pp. 33–41. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.05.041>
26. Xiang Y., Zhang L., Liu C. Electrical properties of carbon nanotubes: From individual to assemblies. *Nanomaterials*, 2025, vol. 15, iss. 15, art. 1165. <https://doi.org/10.3390/nano15151165>
27. Ahlskog M., Herranen O., Leppaniemi J., Mtsuko D. Conduction properties of semiconductive multiwalled carbon nanotubes. *Eur. Phys. J. B*, 2022, vol. 95, iss. 8, art. 130. <https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-022-00392-z>
28. Mtsuko D., Koshio A., Yudasaka M., Iijima S., Ahlskog M. Measurements of the transport gap in semiconducting multiwalled carbon nanotubes with varying diameter and length. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 91, art. 195426. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.195426>
29. Kim H. I., Wang M., Lee S. K., Kang J., Nam J. D., Ci L., Suhr J. Tensile properties of millimeter-long multiwalled carbon nanotubes. *Sci Rep.*, 2017, vol. 7, art. 9512. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-10279-0>
30. Pugno N. M. Young's modulus reduction of defective nanotubes. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, vol. 90, iss. 4, art. 043106. <https://doi.org/10.1063/1.2425048>

Поступила в редакцию 04.11.2025; одобрена после рецензирования 10.12.2025; принята к публикации 19.12.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 04.11.2025; approved after reviewing 10.12.2025; accepted for publication 19.12.2025; published 31.03.2026



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 93–101
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 93–101
<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-93-101>, EDN: TOXVIP

Научная статья
УДК 53.043:543.062:543.426

Гибридный люминесцентный материал на основе электроформованной полимерной матрицы с инкапсулированными квантовыми точками $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$



А. А. Сердобинцев[✉], К. В. Коларькова, В. В. Оломская, Т. Ю. Русанова, И. Ю. Горячева, П. А. Демина

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

Сердобинцев Алексей Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством Института физики, serdobintsevaa@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3281-8352>, AuthorID: 238828

Коларькова Ксения Владимировна, студент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством Института физики, kkolarkova@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6825-129X>

Оломская Вера Владимировна, аспирант кафедры общей и неорганической химии Института химии, o-v-v99@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9065-1648>, AuthorID: 1308882

Русанова Татьяна Юрьевна, доктор химических наук, заведующий кафедрой аналитической химии и химической экологии Института химии, tatyanarys@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5902-3707>, AuthorID: 38756

Горячева Ирина Юрьевна, доктор химических наук, профессор кафедры общей и неорганической химии Института химии, goryachevai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1781-6180>, AuthorID: 50556

Демина Полина Анатольевна, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории «Дистанционно управляемые системы для тераностики» Научного медицинского центра, polina.a.demina@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9203-582X>, AuthorID: 644204

Аннотация. Разработан гибридный люминесцентный материал на основе нетканой нановолокнистой матрицы с инкапсулированными люминесцентными квантовыми точками $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$. Водный коллоид стабилизированных тиогликолевой кислотой квантовых точек вводили в формовочный раствор непосредственно перед процессом электроформования. При этом квантовые точки сохраняли свои люминесцентные свойства и не взаимодействовали с растворителем (диметилформамид). Установлено, что квантовые точки внедрены в полимерную матрицу физически, а не путём химического связывания. Материал может быть использован в качестве сенсорной платформы для определения биоактивных веществ, что показано на примере антибиотика фторхинолонового ряда ципрофлоксацина в водных растворах. Присутствие ципрофлоксацина в растворе приводит к тушению люминесценции квантовых точек, но не вызывает сдвига максимума люминесценции. Это существенно отличается от взаимодействия квантовых точек с ципрофлоксацином непосредственно в водном растворе, так как в этом случае наблюдается батохромный сдвиг. При пропитке образцов полученного гибридного материала водным раствором ципрофлоксацина метод флуориметрического детектирования позволяет уверенно определить антибиотик вплоть до его концентрации $C_M = 1 \cdot 10^{-7}$ М. Предложено объяснение тушения люминесценции квантовых точек на основе взаимодействия молекул ципрофлоксацина с молекулами тиогликолевой кислоты на поверхности квантовых точек. Электростатическое взаимодействие протонированных аминогрупп ципрофлоксацина с диссоциированными карбоксигруппами кислоты на поверхности квантовой точки приводит к тушению люминесценции $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$.

Ключевые слова: квантовые точки, люминесценция, электроформование, нетканые материалы

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-23-00481, <https://rscf.ru/project/24-23-00481/>).

Для цитирования: Сердобинцев А. А., Коларькова К. В., Оломская В. В., Русанова Т. Ю., Горячева И. Ю., Демина П. А. Гибридный люминесцентный материал на основе электроформованной полимерной матрицы с инкапсулированными квантовыми точками $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 93–101. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-93-101>, EDN: TOXVIP

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

Article

Hybrid luminescent material based on an electrospun polymer matrix with encapsulated $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ quantum dots

А. А. Serdobintsev[✉], К. В. Kolarkova, В. В. Olomskaia, Т. Ю. Rusanova, И. Ю. Goryacheva, П. А. Demina



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

Alexey A. Serdobintsev, serdobintsevaa@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3281-8352>

Kseniya V. Kolarkova, kkolarkova@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6825-129X>

Vera V. Olomskaya, o-v-v99@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9065-1648>

Tatiana Yu. Rusanova, tatyaryas@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5902-3707>

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

Polina A. Demina, polina.a.demina@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9203-582X>

Abstract. Background and Objectives: Hybrid polymer materials containing luminescent nanoparticles are promising for creating, in particular, electroluminescent devices. Such materials are able to withstand significant mechanical deformations while maintaining high radiation conversion efficiency with both decreasing and increasing frequency. Among the extensive set of existing approaches for the production of hybrid polymer materials, the electrospinning method allows the use of a wide range of polymers, resulting in formation of disordered structure consisting of fine (hundreds of nanometers diameter) arbitrarily oriented fibers, which makes it possible to obtain a porous fibrous material with a large surface area. The electrospinning method is an effective tool for creating composite structures with nanoparticles encapsulated in polymer fibers that protect nanoparticles from environmental influences. The high porosity of nanofiber nonwovens allows them to be used as the basis for highly sensitive sensors for dangerous and toxic substances due to their large surface area. **Materials and Methods:** The pre-synthesized $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ quantum dots were introduced into the spinning solution of polyacrylonitrile in dimethylformamide immediately before the electrospinning process. Quantum dots retained their luminescent properties and did not interact with the solvent. To carry out the electrospinning process, a high voltage (-53 kV) was applied between the grounded solution supply capillary and the collector using a stabilized power source. The sample spinning time was 30 minutes, and the feed rate of the spinning solution was $750 \mu\text{l/h}$. The obtained hybrid luminescent material was experimentally studied using luminescence analysis. The effect of ciprofloxacin on the luminescent properties of the obtained material was studied by impregnating electroformed samples with aqueous solutions with different concentrations of the antibiotic. **Results:** It has been established that quantum dots are physically embedded in the polymer matrix, and not by chemical bonding. The presence of ciprofloxacin in the solution leads to quenching of the luminescence of quantum dots, but does not cause a shift in the luminescence maximum. This is significantly different from the interaction of quantum dots with ciprofloxacin directly in an aqueous solution, since in this case a bathochromic shift is observed. An explanation of quenching the luminescence of quantum dots based on the interaction of ciprofloxacin molecules with their shells is proposed. In course of $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ quantum dots production, a coating of thioglycolic acid is applied to the surface of the dots to prevent aggregation in water. The protonated aminogroups of ciprofloxacin interact electrostatically with dissociated carboxylic groups of thioglycolic acid, which leads to a change in the quantum dots surface and causes quenching of $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ luminescence. **Conclusion:** A hybrid luminescent material based on a non-woven nanofiber matrix with encapsulated luminescent $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ quantum dots has been developed. The material can be useful as a sensor platform for the determination of bioactive substances. It is possible to confidently determine the fluoroquinolone antibiotic ciprofloxacin in aqueous solution up to its concentration of $C_M = 1 \cdot 10^{-7}$ M by the developed material.

Keywords: quantum dots, luminescence, electrospinning, nonwoven materials

Acknowledgments: This work is supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-23-00481, <https://rscf.ru/project/24-23-00481/>).

For citation: Serdobintsev A. A., Kolarkova K. V., Olomskaya V. V., Rusanova T. Yu., Goryacheva I. Yu., Demina P. A. Hybrid luminescent material based on an electrospun polymer matrix with encapsulated $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ quantum dots. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 93–101 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-93-101>, EDN: TOXVIP

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

Введение

Гибридные полимерные материалы, содержащие люминесцентные наночастицы, перспективны для создания, в частности, электролюминесцентных устройств, работающих на постоянном токе [1, 2]. Такие материалы способны выдерживать значительные механические деформации при сохранении высокой эффективности преобразования излучения как с понижением, так и с повышением частоты [3, 4]. Существует обширный спектр методов создания гибридных полимерных материалов. Метод электроформования позволяет использовать широкий спектр полимеров, формируя из них неупорядоченную структуру из тонких (сотни нанометров) произвольно ориентированных волокон, что позволяет получить пористый на-

новолокнистый материал с большой площадью поверхности [5]. Пористая структура может служить матрицей для многочисленных объектов, включая наночастицы, как встроенных в волокна в готовом виде, так и синтезированных *in situ* при электроформовании [6]. Метод электроформования является эффективным инструментом для создания композитных структур с наночастицами, инкапсулированными в полимерные волокна, которые защищают наночастицы от воздействия окружающей среды. Другим важным преимуществом такого материала является его гибкость, которая может быть полезна при работе с подложками сложной формы или в быстрорастущей области гибкой электроники. Высокая пористость нетканых материалов позволяет использовать их в качестве основы для



высококочувствительных сенсоров опасных и токсичных веществ благодаря большой площади поверхности.

Развитие различных областей науки, таких как медицинская диагностика и защита окружающей среды, вызывает необходимость создания аналитических инструментов, позволяющих обнаруживать и контролировать специфические аналиты. Сенсоры удовлетворяют эту потребность, позволяя высокоселективно и с высокой чувствительностью определять молекулы в анализируемых образцах.

Использование наноматериалов приводит к разработке более чувствительных сенсоров с лучшими характеристиками. Наноматериалы, в том числе нановолокна, обладают свойствами, недостижимыми для объемных материалов, что делает их востребованным дополнением к традиционным методам разработки сенсоров и открывают возможности миниатюризации сенсорных платформ [7].

В последнее время квантовые точки (КТ) активно используются при разработке биосенсоров для определения антибиотиков. КТ представляют собой полупроводниковые наночастицы, имеющие различный состав. При этом особый интерес вызывают тройные КТ AgInS_2 , не содержащие токсичных элементов [8, 9]. При размерах 2–10 нм КТ проявляют уникальные оптические и электронные свойства, такие как широкий спектр поглощения и узкий спектр испускания, высокие квантовые выходы, фотостабильность и большую площадь поверхности – характеристики, которые не наблюдаются в материалах макроразмера.

Так как при уменьшении размера частиц структура энергетических зон начинает меняться, то при достижении наноразмера оптические свойства КТ (длины волн возбуждения и испускания), могут быть «настроены» путем изменения размера, формы или структуры поверхности частиц. Таким образом, КТ нашли применение в качестве неорганических флуорофоров, благодаря яркой, «настраиваемой по размеру» люминесценции с узкими симметричными полосами излучения и высокой фотостабильностью [10].

Исходя из вышесказанного, целью настоящей работы стала разработка люминесцентного нановолокнистого материала на основе полиакрилонитрила, модифицированного КТ состава $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$. В качестве аналита, определяемого с помощью разработанного материала, был

использован антибактериальный препарат хинолонового ряда ципрофлоксацин.

1. Материалы и методы

1.1. Материалы

Полиакрилонитрил ($[-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CN})-]_n$, PAN, 99.0%) и ципрофлоксацин ($\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{FN}_3\text{O}_3$, CF, $M_r = 331.34$ г/моль, 98.0%) производства Sigma-Aldrich (Merck, Германия). N,N-Диметилформамид ($\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}$, DMF, х.ч.) и соляная кислота (HCl, х.ч.) производства Вектон (Вектон, Россия).

Для приготовления всех растворов использовали дистиллированную воду (ГОСТ 6709-72).

1.2. Приготовление растворов

Стандартный раствор ципрофлоксацина с концентрацией $1 \cdot 10^{-2}$ М готовили растворением точной навески (0.0828 г) в 0.1 М HCl в мерной колбе объемом 25 мл. Рабочие растворы готовили путем последовательного разбавления стандартного раствора.

Рабочие растворы $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ готовили путем разбавления исходного раствора КТ. Исходный раствор $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ получен методом коллоидного синтеза по методике [11]. В данной работе использовали фракцию № 2 (красные КТ).

Рабочие растворы смесей ципрофлоксацина и $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ готовили путем смешения исходных растворов в диапазоне концентраций антибиотика от $1 \cdot 10^{-2}$ до $1 \cdot 10^{-7}$ М и с разбавлением КТ в 40, 100 и 500 раз.

Спектры поглощения растворов записывали на спектрофотометре Shimadzu UV-1800 (Shimadzu, Япония).

1.3. Получение и характеристика люминесцентного нетканого материала

Навеску полимера (13% мас.) растворяли в DMF при постоянном перемешивании (300 об/мин). После полного растворения полимера к полученному раствору приливали раствор КТ (10% об.) и продолжали перемешивание еще в течение 30 мин до образования гомогенной смеси. Далее полученную смесь переносили в формовочный шприц и начинали процесс электроформования. Шприцевой насос (SPLab02, Китай) располагался на горизонтальной подвижной платформе, расстояние от кончика формовочной иглы до коллектора



составляло 20 см. Для осуществления процесса электроформования между заземленным капилляром для подачи раствора и коллектором подавали напряжение (-53 кВ) с помощью стабилизированного источника питания (FUG HCP 140-65000, Германия). Время формования образца составляло 30 мин, скорость подачи формовочного раствора была 750 мкл/ч. В качестве контрольного образца выступал нетканый материал, полученный из 13%-ного раствора PAN.

Оптические свойства полученных люминесцентных материалов изучали с помощью мультимодального микропланшетного считывателя Synergy H1 (BioTek, США).

2. Результаты и их обсуждение

2.1. Спектральные характеристики ципрофлоксацина

Благодаря высокой эффективности, широкому спектру действия, биодоступности, удоб-

ным формам выпуска препаратов хинолонового ряда, они находят применение в клинической практике [12]. Согласно некоторым исследованиям, возможно развитие бактериальной резистентности к фторхинолонам из-за необоснованного применения в терапии заболеваний, наличия следовых количеств в пище животного происхождения, в сточных водах и бытовых отходах. Соответственно, есть высокий риск того, что данный тип препаратов может стать терапевтически неэффективным [13].

В зависимости от pH среды для ципрофлоксацина характерны четыре формы: нейтральная, анионная, катионная, и цвиттер-ионная [14]. В кислой среде при $\text{pH} < 5$ в результате протонирования кислорода карбонильной группы и азота пиперазинового кольца образуется катионная форма фторхинолона.

Хромофорные группы ципрофлоксацина, включающие пиперазиновое кольцо и карбоксильную группу, характеризуются в спектре поглощения высокоинтенсивной полосой в об-

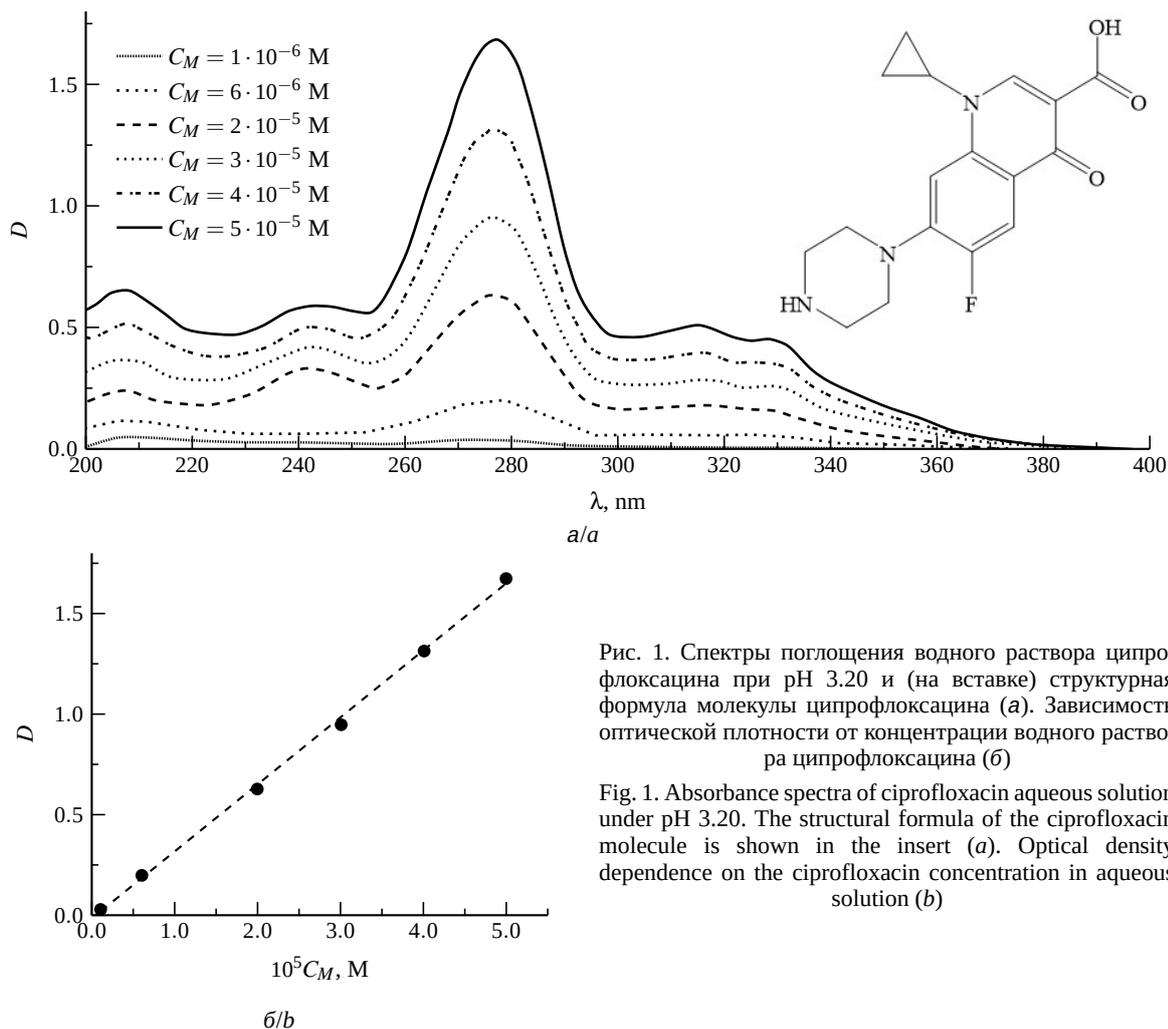


Рис. 1. Спектры поглощения водного раствора ципрофлоксацина при pH 3.20 и (на вставке) структурная формула молекулы ципрофлоксацина (а). Зависимость оптической плотности от концентрации водного раствора ципрофлоксацина (б)

Fig. 1. Absorbance spectra of ciprofloxacin aqueous solution under pH 3.20. The structural formula of the ciprofloxacin molecule is shown in the insert (a). Optical density dependence on the ciprofloxacin concentration in aqueous solution (b)



ласти 256–293 нм с максимумом при 279 нм и менее интенсивными при 204, 240, 315 и 330 нм (рис. 1, а). В данном исследовании спектрофотометрическое определение ципрофлоксацина проводили при длине волны, соответствующей максимуму поглощения электромагнитного излучения ципрофлоксацином (279 нм).

Из рис. 1, б видно, что зависимость оптической плотности раствора от концентрации ципрофлоксацина носит линейный характер, что соотносится с законом Бугера – Ламберта – Бера. Следовательно, указанный закон может быть использован для расчета молярного коэффициента поглощения. Рассчитанные коэффициенты молярного поглощения полос (ϵ) ципрофлоксацина при pH 3.20 равны $\epsilon_{207} = 1.2 \times 10^4$ моль/л, $\epsilon_{290} = 1.4 \cdot 10^4$ моль/л, $\epsilon_{277} = 3.2 \cdot 10^4$ моль/л и позволяют отнести их к π - π^* – переходам в сопряженной системе молекулы [15].

2.2. Влияние ципрофлоксацина на интенсивность люминесценции квантовых точек

Предварительно определено влияние DMF – растворителя, используемого для электроформования, – на форму спектра люминесценции КТ AgInS₂/ZnS. Как видно из рис. 2, а, в спектре люминесценции AgInS₂/ZnS присутствует широкий пик с максимумом при длине волны 649 нм ($\lambda_{\text{возб}} = 360$ нм), который практически не изменяется при использовании воды и DMF в качестве растворителей.

В присутствии ципрофлоксацина при той же волне возбуждения наблюдается bathochromic сдвиг максимума люминесценции КТ с 649 до 688 нм (рис. 2, б). Из рис. 2, в видно, что соотношение между интенсивностями пиков ципрофлоксацина и AgInS₂/ZnS варьируется в зависимости от концентрации антибиотика в растворе.

Установлена линейная зависимость между концентрацией ципрофлоксацина и интенсивностью люминесцентного сигнала антибиотика (рис. 2, г) с коэффициентом детерминации $R^2 \approx 0.94$.

Вероятная схема, объясняющая взаимодействие между стабилизированными тиогликолевой кислотой КТ AgInS₂/ZnS и ципрофлоксацином, представлена на рис. 3 [16]. Происходит электростатическое взаимодействие протонированных аминогрупп ципрофлоксацина с диссоциированными карбоксигруппами кислоты, что

приводит к изменению поверхности КТ, и вызывает тушение люминесценции AgInS₂/ZnS [17].

2.3. Инкапсуляция квантовых точек в нетканую матрицу

Для инкапсуляции и иммобилизации активных веществ и частиц в различные нетканые матрицы чаще всего используется метод адсорбции [6]. Однако в данной работе был использован подход, при котором активные вещества добавляются в формовочный раствор, и инкапсуляция происходит уже непосредственно в процессе электроформования [3,4]. Поскольку КТ AgInS₂/ZnS не растворимы в DMF (рис. 2, а), то основным условием успешной инкапсуляции наночастиц в полимерные волокна являлось образование однородной смеси с раствором полимера. В результате были получены образцы люминесцентных нетканых материалов, фотографии которых представлены на рис. 4.

На рис. 5, а показаны спектры люминесценции (при $\lambda_{\text{возб}} = 360$ нм) нетканых материалов PAN и PAN–AgInS₂/ZnS. Как видно из рисунка, в спектре люминесценции PAN присутствуют два максимума при длине волны 416 и 445 нм.

По сравнению с системой ципрофлоксацин–AgInS₂/ZnS, максимум люминесценции полученных нановолокон, соответствующий AgInS₂/ZnS, не меняется, что свидетельствует об отсутствии взаимодействия в нановолокнах между PAN и AgInS₂/ZnS. Это позволяет предположить, что КТ внедрены в полимерную матрицу физически, а не через химическое связывание.

Введение ципрофлоксацина в систему PAN–AgInS₂/ZnS вызывает изменение спектра люминесценции КТ. Как видно из рис. 5, б, PAN и ципрофлоксацин имеют близкие значения λ_{max} в диапазоне 400–500 нм, что приводит к частичному перекрытию полос. При высоких концентрациях ципрофлоксацина ($C_M = 1 \cdot 10^{-2} - 1 \cdot 10^{-3}$ М) практически полностью подавляется люминесценция как полимерной матрицы, так и КТ AgInS₂/ZnS, что может быть объяснено тушением их люминесценции ципрофлоксацином. При концентрации ципрофлоксацина $C_M = 1 \cdot 10^{-4}$ М наблюдается как люминесценция антибиотика, так и люминесценция AgInS₂/ZnS, а также плечо в диапазоне 415–430 нм, характерное для структуры PAN. Снижение концентрации ципрофлоксацина до $C_M = 1 \cdot 10^{-7}$ М приводит к увеличению сигнала КТ и нетканой матрицы, приближая профиль спектра люминесценции к профилю исходной системы PAN–AgInS₂/ZnS.

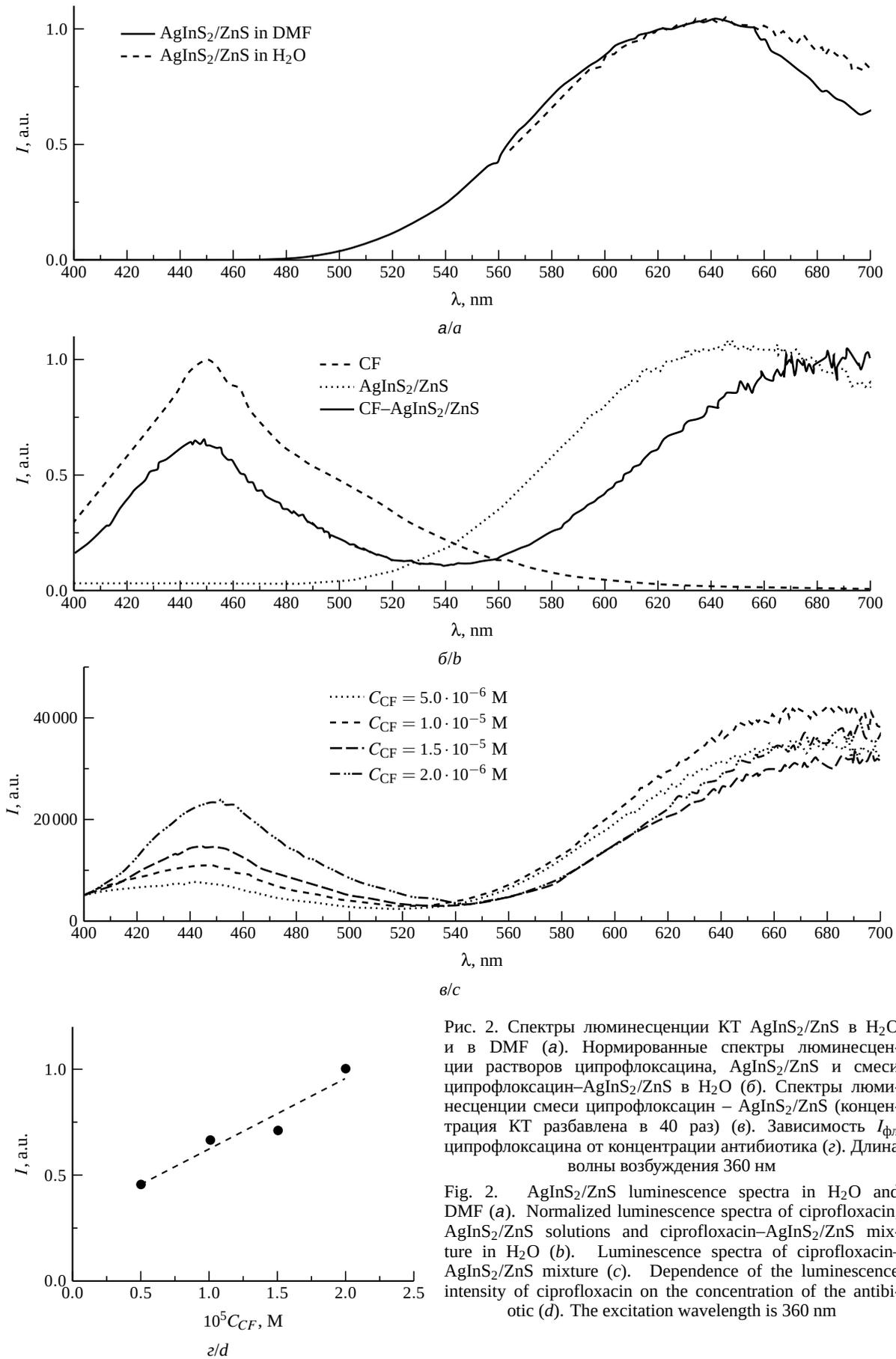


Рис. 2. Спектры люминесценции КТ AgInS₂/ZnS в H₂O и в DMF (а). Нормированные спектры люминесценции растворов ципрофлоксацина, AgInS₂/ZnS и смеси ципрофлоксацин–AgInS₂/ZnS в H₂O (б). Спектры люминесценции смеси ципрофлоксацин – AgInS₂/ZnS (концентрация КТ разбавлена в 40 раз) (в). Зависимость I_{фл} ципрофлоксацина от концентрации антибиотика (г). Длина волны возбуждения 360 нм

Fig. 2. AgInS₂/ZnS luminescence spectra in H₂O and DMF (a). Normalized luminescence spectra of ciprofloxacin, AgInS₂/ZnS solutions and ciprofloxacin–AgInS₂/ZnS mixture in H₂O (b). Luminescence spectra of ciprofloxacin–AgInS₂/ZnS mixture (c). Dependence of the luminescence intensity of ciprofloxacin on the concentration of the antibiotic (d). The excitation wavelength is 360 nm

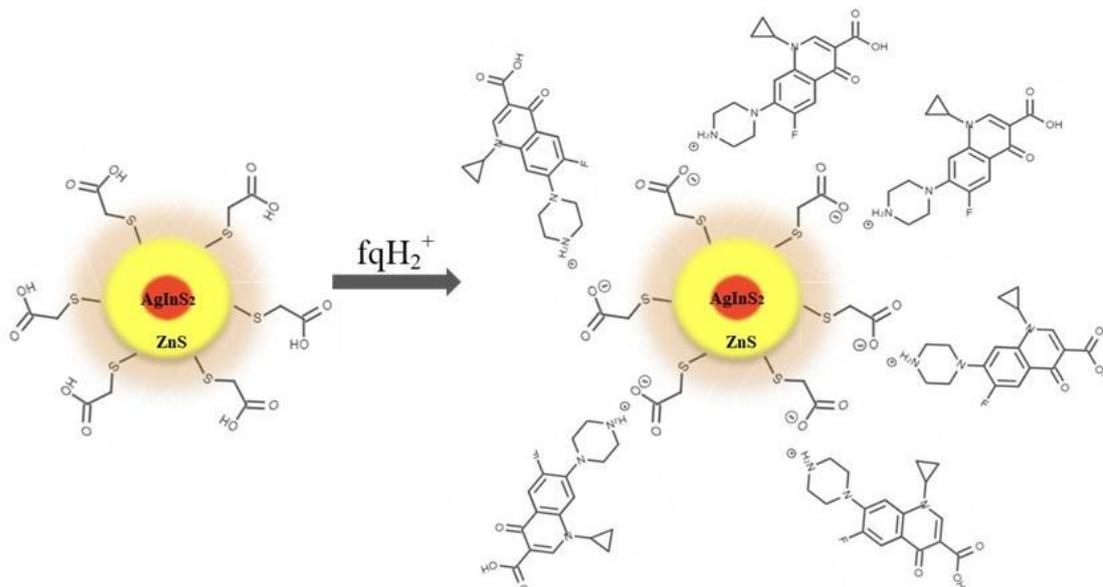


Рис. 3. Вероятная схема тушения люминесценции КТ AgInS₂/ZnS в присутствии ципрофлоксацина (цвет онлайн)
 Fig. 3. Probable scheme of quenching AgInS₂/ZnS luminescence in the presence of ciprofloxacin (color online)

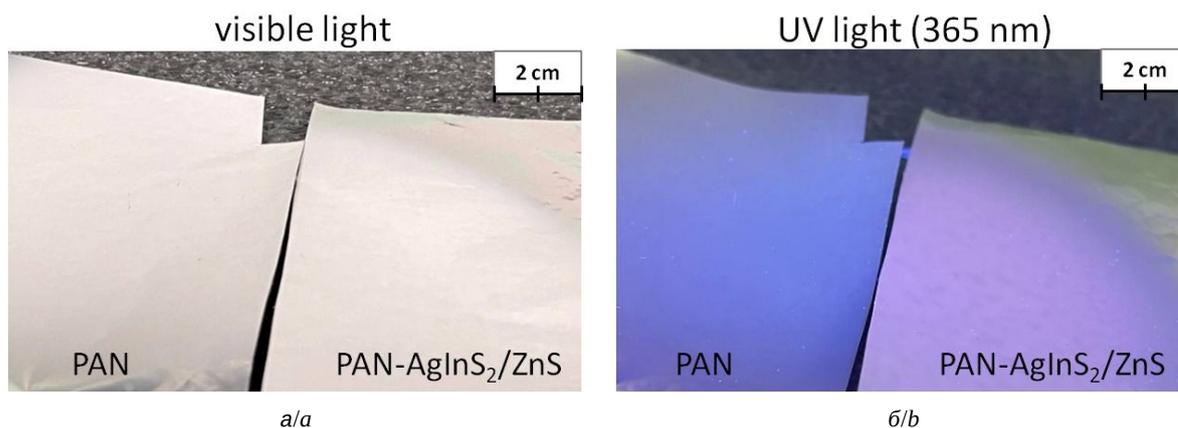


Рис. 4. Фотографии нетканых материалов PAN и PAN–AgInS₂/ZnS в видимом (а) и ультрафиолетовом (б) свете. Длина волны возбуждения 365 нм (цвет онлайн)
 Fig. 4. Photos of PAN and PAN–AgInS₂/ZnS nonwovens in visible (a) and ultraviolet (b) light. The excitation wavelength is 365 nm (color online)

Влияние ципрофлоксацина на интенсивность люминесценции КТ AgInS₂/ZnS, инкапсулированных в нетканую матрицу PAN, изучалось следующим образом. Для каждой концентрации ципрофлоксацина подготавливалось три образца PAN–AgInS₂/ZnS для повышения достоверности экспериментальных данных. На первом этапе фиксировался спектр люминесценции образца в исходном состоянии, затем образец пропитывался раствором ципрофлоксацина с заданной концентрацией, и спектр люминесценции регистрировался снова. Такой подход позволяет минимизировать погрешности, связанные с неоднородностью нетканой матрицы. Пик КТ AgInS₂/ZnS на каждом спек-

тре аппроксимировался функцией Гаусса, затем сравнивались параметры пиков каждого образца в исходном состоянии и после добавления ципрофлоксацина. Данные по образцам, пропитанным раствором ципрофлоксацина с идентичной концентрацией, усреднялись. По результатам анализа установлено, что наиболее значимые изменения наблюдаются в интенсивности пика AgInS₂/ZnS. Положение пика и его ширина на половине высоты не имеют достоверно определяемых изменений при варьировании концентрации ципрофлоксацина.

Как видно из рис. 5, в, присутствие ципрофлоксацина в растворе уверенно определяется

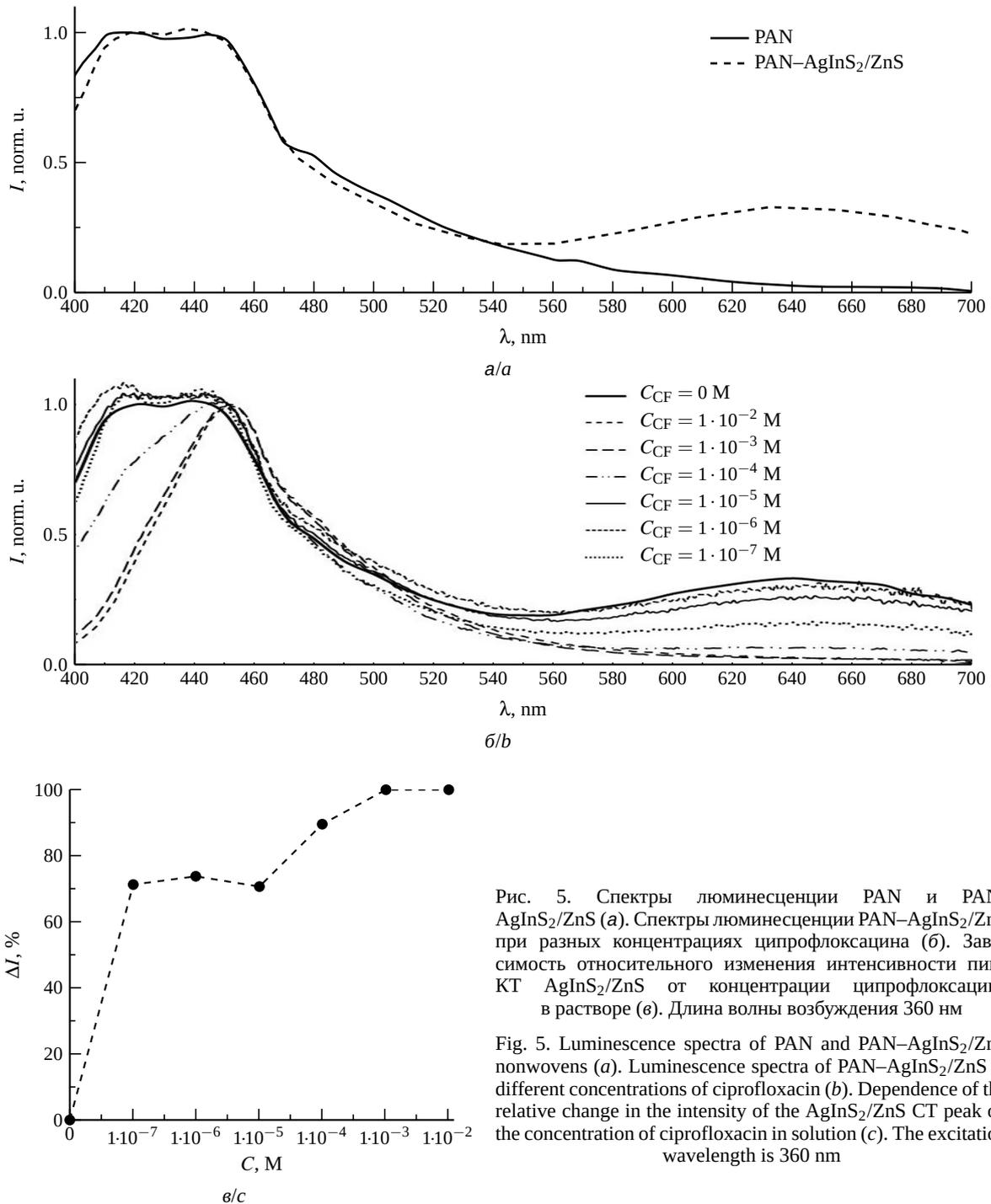


Рис. 5. Спектры люминесценции PAN и PAN–AgInS₂/ZnS (а). Спектры люминесценции PAN–AgInS₂/ZnS при разных концентрациях ципрофлоксацина (б). Зависимость относительного изменения интенсивности пика КТ AgInS₂/ZnS от концентрации ципрофлоксацина в растворе (в). Длина волны возбуждения 360 нм

Fig. 5. Luminescence spectra of PAN and PAN–AgInS₂/ZnS nonwovens (a). Luminescence spectra of PAN–AgInS₂/ZnS at different concentrations of ciprofloxacin (b). Dependence of the relative change in the intensity of the AgInS₂/ZnS CT peak on the concentration of ciprofloxacin in solution (c). The excitation wavelength is 360 nm

с помощью системы PAN–AgInS₂/ZnS вплоть до концентрации $C_M = 1 \cdot 10^{-7}$ М. Наблюдается снижение интенсивности пика AgInS₂/ZnS на величину от 70 до 90%. При этом величина изменения интенсивности практически идентична для концентраций ципрофлоксацина от $C_M = 1 \times 10^{-5}$ М до $C_M = 1 \cdot 10^{-7}$ М. И только при повышении концентрации до $C_M = 1 \cdot 10^{-4}$ М наблюдается рост её абсолютной величины до 90%. Вероятно, постоянство относительного изменения

интенсивности пика AgInS₂/ZnS при малых концентрациях ципрофлоксацина обусловлено особенностями проникновения молекул антибиотика в волокна полимерной нетканой матрицы.

Выводы

В результате проведённых исследований разработан гибридный люминесцентный материал PAN–AgInS₂/ZnS, позволяющий определять присутствие антибиотика ципрофлоксацина в водных



растворах при низких концентрациях ($C_M = 1 \times 10^{-7}$ М). Введение ципрофлоксацина в систему приводит к подавлению люминесценции при высоких концентрациях и к постоянному снижению интенсивности пика КТ при низких ($C_M = 10^{-5}$ М и менее). При этом в нановолокнах PAN–AgInS₂/ZnS отсутствует химическое взаимодействие между полимером и КТ.

Предложена схема подавления люминесценции КТ при взаимодействии их оболочек с молекулами ципрофлоксацина.

Полученные результаты позволяют создать основу для разработки портативных люминесцентных сенсоров для мониторинга фторхинолонов в биологических жидкостях, фармацевтических препаратах и экологических образцах.

Список литературы / References

- Liu X., Yu D., Huo C., Song X., Gao Y., Zhang S., Zeng H. A Perovskite Light-Emitting Device Driven by Low-Frequency Alternating Current Voltage. *Adv. Opt. Mater.*, 2018, vol. 6, iss. 16, art. 1800206. <https://doi.org/10.1002/adom.201800206>
- Zhang X., Wang F. Recent advances in flexible alternating current electroluminescent devices. *APL Mater.*, 2021, vol. 9, iss. 3, art. 030701. <https://doi.org/10.1063/5.0040109>
- Serdobintsev A., Neplokh V., Koryakin A., Kozhevnikov I., Yakubova A., Kirilenko D., Saveleva M., Makarov S., Mukhin I., Demina P. In situ synthesis and stabilization of perovskite quantum dots in electrospun fibers. *J. Semicond.*, 2025, vol. 46, iss. 2, art. 022801. <https://doi.org/10.1088/1674-4926/25060014>
- Neplokh V., Markina D. I., Baeva M., Pavlov A. M., Kirilenko D. A., Mukhin I. S., Pushkarev A. P., Makarov S. V., Serdobintsev A. A. Recrystallization of CsPbBr₃ nanoparticles in fluoropolymer nonwoven mats for down-and up-conversion of light. *Nanomaterials*, 2021, vol. 11, iss. 2, art. 412. <https://doi.org/10.3390/nano11020412>
- Xue J., Wu T., Dai Y., Xia Y. Electrospinning and Electrospun Nanofibers: Methods, Materials, and Applications. *Chem. Rev.*, 2019, vol. 119, iss. 8, pp. 5298–5415. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00593>
- Arzhanukhina A. I., Komova N. S., Pavlov A. M., Serdobintsev A. A., Rusanova T. Y., Goryacheva I. Y. SERS Assays Based on Electrospun Nanofibers: Preparation and Analytical Applications. *Crit. Rev. Anal. Chem.*, 2024, vol. 54, iss. 7, pp. 2309–2324. <https://doi.org/10.1080/10408347.2023.2165876>
- Halicka K., Cabaj J. Electrospun Nanofibers for Sensing and Biosensing Applications—A Review. *Int. J. Mol. Sci.*, 2021, vol. 22, iss. 12, art. 6357. <https://doi.org/10.3390/ijms22126357>
- Ponomaryova T. S., Olomsкая V. V., Abalymov A. A., Anisimov R. A., Drozd D. D., Drozd A. V., Novikova A. S., Lomova M. V., Zakharevich A. M., Goryacheva I. Y., Goryacheva O. A. Visualization of 2D and 3D Tissue Models via Size-Selected Aqueous AgInS/ZnS Quantum Dots. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2024, vol. 16, iss. 31, pp. 40483–40498. <https://doi.org/10.1021/acsami.4c05681>
- Ding R., Chen Y., Wang Q., Wu Z., Zhang X., Li B., Lin L. Recent advances in quantum dots-based biosensors for antibiotics detection. *J. Pharm. Anal.*, 2022, vol. 12, iss. 3, pp. 355–364. <https://doi.org/10.1016/j.jpha.2021.08.002>
- Mal J., Nancharaiyah Y. V., Hullebusch E. D. Van, Lens P. N. L. Metal chalcogenide quantum dots: Biotechnological synthesis and applications. *RSC Adv.*, 2016, vol. 6, iss. 47, pp. 41477–41495. <https://doi.org/10.1039/C6RA08447H>
- Ponomaryova T. S., Olomsкая V. V., Novikova A. S., Goryacheva I. Y. Effect of pH and ionic strength on the photoluminescence of size-fractionated AgInS₂/ZnS quantum dots. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 3, pp. 238–244. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-3-238-244>
- Pham T. D. M., Ziora Z. M., Blaskovich M. A. T. Quinolone antibiotics. *Medchemcomm*, 2019, vol. 10, iss. 10, pp. 1719–1739. <https://doi.org/10.1039/c9md00120d>
- Rusu A., Hancu G., Uivarosi V. Fluoroquinolone pollution of food, water and soil, and bacterial resistance. *Environ. Chem. Lett.*, 2014, vol. 13, iss. 1, pp. 21–36. <https://doi.org/10.1007/s10311-014-0481-3>
- Polishchuk A. V., Karaseva E. T., Medkov M. A., Karasev V. E. Fluoroquinolones: Composition, Structure, and Antibacterial Properties. *Vestnik of the Far East Branch of the Russian Academy of Sciences*, 2005, no. 2 (120), pp. 128–137 (in Russian).
- Elchishcheva Yu. B. *Spektrofotometricheskiye metody analiza: uchebnoye posobiye* [Spectrophotometric methods of analysis: A tutorial]. Perm, Perm University Publ., 2023, 188 p. (in Russian).
- Stroyuk O., Raevskaya A., Spranger F., Selyshchev O., Dzhagan V., Schulze S., Zahn D. R. T., Eychmüller A. Origin and Dynamics of Highly Efficient Broadband Photoluminescence of Aqueous Glutathione-Capped Size-Selected Ag-In-S Quantum Dots. *J. Phys. Chem. C*, 2018, vol. 122, iss. 25, pp. 13648–13658. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b00106>
- Yang B., Zhang Y., Zhang Q., Liu Y., Yan Y. Study on the preparation of water-soluble AgInS₂ quantum dots and their application in the detection of ciprofloxacin. *Mater. J. Sci. Mater. Electron.*, 2019, vol. 30, pp. 18794–18801. <https://doi.org/10.1007/s10854-019-02233-9>

Поступила в редакцию 23.11.2025; одобрена после рецензирования 15.12.2025; принята к публикации 19.12.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 23.11.2025; approved after reviewing 15.12.2025; accepted for publication 19.12.2025; published 31.03.2026



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 102–111

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 102–111

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-102-111>, EDN: UWN0HY

Научная статья

УДК 543.424.2:621.793.1:677.494.675

Разработка и оптимизация нетканых подложек полиамида-6 для гигантского комбинационного рассеяния



Е. С. Прихожденко

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

Прихожденко Екатерина Сергеевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры инноватики Института физики, prikhozhdenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2700-168X>, AuthorID: 850345

Аннотация. В данном исследовании были разработаны и оптимизированы подложки для гигантского комбинационного рассеяния, изготовленные из нетканого материала полиамида-6, который был покрыт золотом методом вакуумного напыления. Особое внимание было уделено влиянию времени напыления (от 1 до 8 мин при постоянном токе 25 мА) на активность подложек. Сканирующая электронная микроскопия показала, что увеличение времени напыления до 6–8 мин приводит к более равномерному покрытию волокон золотом, тогда как при меньших временах (особенно для диапазона 2–4 мин) наблюдаются локальные дефекты покрытия. В качестве модельного анализита использовали 4-меркаптобензойную кислоту в концентрации 10^{-5} М. Для интегрального анализа спектров гигантского комбинационного рассеяния был использован метод главных компонент. Для всех типов подложек был рассчитан коэффициент усиления. Максимальное усиление сигнала $(7.70 \pm 1.02) \cdot 10^4$ для полосы 1073 см^{-1} было достигнуто при времени напыления 8 мин. Особое внимание уделялось также проверке воспроизводимости подложек: были протестированы три идентичных образца, напылив их через маску, и получили среднее значение коэффициента усиления $(7.71 \pm 1.84) \cdot 10^4$ с относительным стандартным отклонением, равным 23.9%. Результаты исследования показали, что созданные подложки могут быть использованы для аналитических применений гигантского комбинационного рассеяния. Тем не менее, для улучшения воспроизводимости результатов необходимо дополнительно оптимизировать параметры напыления.

Ключевые слова: гигантское комбинационное рассеяние, полиамид-6, вакуумное напыление, 4-меркаптобензойная кислота, коэффициент усиления, воспроизводимость подложек

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-79-10270, <https://rscf.ru/project/22-79-10270/>). Автор благодарит Всеволода Аткина за проведённые измерения на сканирующем электронном микроскопе.

Для цитирования: Прихожденко Е. С. Разработка и оптимизация нетканых подложек полиамида-6 для гигантского комбинационного рассеяния // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 102–111. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-102-111>, EDN: UWN0HY

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

Article

Development and optimization of electrospun polyamide-6 nonwoven substrate for surface-enhanced Raman scattering

E. S. Prikhozhenko

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

Ekaterina S. Prikhozhenko, prikhozhdenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2700-168X>, AuthorID: 850345

Abstract. Background and Objectives: Surface-enhanced Raman scattering (SERS) has emerged as a powerful analytical technique for ultrasensitive molecular detection, finding applications in biomedical diagnostics, environmental monitoring, and food safety. However, the widespread adoption of SERS is limited by the need for reproducible, cost-effective substrates with high enhancement factors. While various nanostructured platforms have been explored, polymer-based substrates decorated with noble metals offer unique advantages including flexibility, tunable morphology, and scalability. This study focuses on developing and optimizing SERS-active substrates using electrospun polyamide-6 (PA-6) nonwoven materials coated with gold via vacuum sputtering. The primary objectives were to: (i) systematically investigate the effect of gold deposition time (1–8 min) on substrate morphology and SERS performance; (ii) determine the optimal sputtering parameters for maximum signal enhancement; (iii) evaluate substrate reproducibility using statistical analysis of large-area SERS mapping data. **Materials and Methods:** PA-6 nonwoven substrates were produced by electrospinning from formic/acetic acid solution (1 : 1 ratio, 15 mass.%). Gold was deposited via magnetron sputtering at constant current (25 mA) with varying times (1–8 min). For reproducibility tests, patterned substrates were created



using a mask with a 3×3 mm square holes. 4-mercaptobenzoic acid (4-MBA, 10^{-5} M in ethanol) was used as analyte. The reference Raman spectra were obtained from 4-MBA (10^{-3} M) on uncoated PA-6. 2500 SERS spectra/substrate (50×50 spectra, 8 substrates) were collected for substrates optimization. In reproducibility study, 22500 total SERS spectra were analyzed (3 substrates \times 3 areas \times 3 maps with 50×50 spectra/map). **Results:** SEM has revealed improved gold coverage uniformity at longer deposition times (6–8 min). Shorter times (2–4 min) have shown discontinuous coatings with defects. Principal component analysis (PCA, PC1 explained variance: 54.3%) has identified optimal performance at 8 min Au deposition. Maximum EF (8 min): $(7.70 \pm 1.02) \cdot 10^4$ at 1073 cm^{-1} . Characteristic 4-MBA peaks ($1073, 1581 \text{ cm}^{-1}$) have shown consistent enhancement profiles. Triplicate substrates have shown average EF = $(7.71 \pm 1.84) \cdot 10^4$ with relative standard deviation of 23.9% across all measurements. **Conclusion:** This study has demonstrated that vacuum-sputtered gold on electrospun PA-6 materials produces effective SERS substrates with enhancement factors $>10^4$. The 8-minute deposition time has yielded optimal performance, balancing coating uniformity with enhancement capability. While the substrates show promise for practical applications, the observed $\sim 24\%$ signal variability suggests opportunities for further optimization. The developed substrates combine the advantages of polymer flexibility with metal-enhanced sensitivity, offering a viable platform for various SERS applications.

Keywords: surface-enhanced Raman scattering, polyamide-6, vacuum sputtering, 4-mercaptobenzoic acid, enhancement factor, substrates reproducibility

Acknowledgments: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-79-10270, <https://rscf.ru/project/22-79-10270/>). The author thanks Vsevolod Atkin for the SEM measurements.

For citation: Prikhodzhenko E. S. Development and optimization of electrospun polyamide-6 nonwoven substrate for surface-enhanced Raman scattering. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 102–111 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-102-111>, EDN: UWN0HY

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

Введение

Явление гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) лежит в основе эффективного аналитического метода, который позволяет обнаруживать молекулы даже при их крайне низких концентрациях [1–4]. Возникновение ГКР связано с эффектом плазмонного усиления электромагнитного поля вблизи наноструктурированных металлических поверхностей [5, 6]. С момента открытия этого явления в 1970-х гг. [7–9], метод ГКР нашёл широкое применение в различных областях, включая биоанализ [10, 11], медицинскую диагностику [12–14], биосенсоры [15–17]. Однако практическое применение этого метода затруднено из-за необходимости создания стабильных, воспроизводимых и экономически эффективных подложек с высоким коэффициентом усиления.

Современные подложки для ГКР можно разделить на две основные категории: суспензии металлических наночастиц или микроструктуры, декорированные наночастицами [18–20]; плоскостные образцы с наноструктурированной поверхностью [21–24]. Последние могут быть использованы в качестве одноразовых тест-полосок или многоразовых очищаемых сенсоров [25–27]. Среди множества способов создания таких подложек особое внимание привлекает технология вакуумного напыления благородных металлов, таких как золото и серебро, на пористые полимерные матрицы [28, 29]. Этот метод даёт возможность контролировать толщину и форму металлического слоя, что является критически

важным для обеспечения оптимального усиления сигнала.

Нетканые материалы на основе полиамида-6 (ПА-6; polyamide-6, PA-6) являются перспективной основой для ГКР-подложек благодаря их уникальным свойствам: высокой удельной поверхности, химической устойчивости и механической прочности [30–32]. Однако, как показывают последние исследования [33], эффективность таких подложек сильно зависит от параметров напыления (времени, тока, давления) и морфологии получаемого металлического слоя.

В данной работе представлено систематическое исследование влияния времени вакуумного напыления золота (1–8 мин при постоянном токе 25 мА) на морфологические и характеристики ГКР-подложек на основе нетканого ПА-6. В качестве модельного вещества использовался спиртовой раствор 4-меркаптобензойной кислоты (4-МБК; 4-mercaptobenzoic acid, 4-MBA) [34]. Для интегральной оценки эффективности разрабатываемых подложек ГКР использовались метод анализа главных компонент (ГК, principal component analysis, PCA) и расчёт коэффициента усиления (enhancement factor, EF) на определённых полосах ГКР раствора 4-МБК. Особое внимание уделялось оценке воспроизводимости сигнала как на одной подложке, так и между разными образцами. Полученные результаты имеют важное значение для разработки эффективных и воспроизводимых подложек ГКР на основе нетканых материалов, что может расширить возможности применения метода в практической аналитике.



1. Материалы и методы

1.1. Материалы

В работе использовался полиамид-6 (ПА-6), произведенный фирмой Ultramid® (BASF, Людвигсхафен, Германия). Муравьиная (ч.д.а.) и уксусная (х.ч.) кислоты, а также этанол были приобретены у ЗАО Вектон (Санкт-Петербург, Россия). 4-меркаптобензойная кислота (90%) произведена Sigma-Aldrich (Сент-Луис, Миссури, США).

1.2. Получение ГКР-подложек

Процесс электроформования ПА-6 проводился на установке NanospiderNSLAB 200S (Elmarco, Чехия) из раствора (15 мас.%) в смеси концентрированных уксусной и муравьиной кислот в соотношении 1:1 [35]. Формирование слоя золота на поверхности нетканого материала проводилось методом вакуумного напыления при фиксированной силе тока (25 мА) и разном времени напыления – 1–8 мин. Также проводилось напыление через металлическую маску с регулярными квадратными отверстиями размером 3×3 мм.

1.3. Инкубация в анализе

Для регистрации сигналов комбинационного рассеяния (КР) и ГКР были приготовлены спиртовые растворы 4-МБК в концентрациях 10^{-3} М и 10^{-5} М соответственно. Подложки размером 5×5 мм помещали в 1 мл раствора аналита и инкубировали в течение 30 мин. Время инкубации выбрано на основе предшествующих работ [36]. Затем подложки промывали спиртом и размещали на измерительный столик. Для измерения сигнала КР в качестве подложки использовали образец ПА-6 без напыления золота.

1.4. Спектроскопия КР

Для регистрации спектров КР и ГКР использовался конфокальный спектрометр Renishaw inVia (Renishaw, Уоттон-андер-Эдж, Великобритания), оснащённый лазером с длиной волны 785 нм. Все измерения проводились с использованием объектива 50× с числовой апертурой 0.5. Параметры измерений сигнала КР: длина волны лазера 785 нм, мощность лазера 2.5 мВт, время получения спектра 30 с. Параметры измерений сигнала ГКР: длина волны лазера 785 нм, мощность лазера 0.1%, время получения спектра 0.5 с. В случае сигнала КР, было зарегистрировано 5 единичных спектров. Для ГКР для каждой подложки регистрировалась карта распределения

сигнала размером 50×50 точек с шагом 1 мкм. При исследовании воспроизводимости сигналов с помощью напыления через маску было получено 3 подложки, на каждой из которых были зарегистрированы по 3 карты 50×50 точек с 3 отдельными ячейками.

1.5. Анализ данных

В процессе работы были использованы данные, полученные с помощью программного обеспечения Renishaw WiRE v.4.2 (Renishaw, Уоттон-андер-Эдж, Великобритания). При необходимости к этим данным применялся инструмент Cosmic Ray Removal для устранения космических лучей. Для удаления полиномиального фона из собранных карт использовался инструмент Subtract Baseline. В качестве функции для удаления фона был выбран полином десятой степени.

Дальнейшая обработка информации выполнялась с применением версии языка Python 3.6 в среде Jupyter Notebook. Для загрузки данных спектроскопии ГКР была задействована библиотека renishawWiRE. Метод анализа главных компонент применялся с помощью decomposition.PCA библиотеки sci-kit learn [37]. Факторный анализ применялся с помощью decomposition.FactorAnalysis библиотеки sci-kit learn.

Аппроксимация двух основных ГКР-полос 1073 и 1581 см^{-1} с помощью модуля curve_fit из библиотеки scipy.optimize производилась по следующей формуле:

$$y = \frac{I \cdot \gamma^2}{(x - x_0)^2 + \gamma^2}, \quad (1)$$

где y – результат аппроксимации, x – волновые числа в области аппроксимации, x_0 – положение пика, I – интенсивность пика, γ – полуширина на полувысоте.

Расчёт коэффициента усиления (КУ) производился по формуле:

$$\text{КУ} = \frac{I_{\text{ГКР}}}{I_{\text{КР}}} \cdot \frac{c_{\text{КР}}}{c_{\text{ГКР}}} \cdot \frac{p_{\text{КР}}}{p_{\text{ГКР}}} \cdot \frac{t_{\text{КР}}}{t_{\text{ГКР}}}, \quad (2)$$

где I – интенсивность, входящая в формулу (1), c – концентрация, p – мощность лазера, t – время накопления сигнала.

Результаты и их обсуждение

В рамках данной работы подложки для ГКР были изготовлены путём вакуумного напыления золота на нетканый материал ПА-6. В процессе эксперимента ток напыления оставался постоянным и составлял 25 мА, а время напыления



изменялось от 1 до 8 мин с шагом в одну минуту. Изображения полученных подложек были получены с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ; scanning electron microscopy, SEM) в режиме обратно-отражённых электронов, что позволило детально изучить структуру и качество подложек (рис. 1).

К сожалению, какую-либо закономерность в морфологии получившихся образцов на изображениях СЭМ выявить не удалось, однако стоит отметить, что при малом времени напыления (особенно 2 мин или 4 мин), наблюдаются дефекты на поверхности отдельных нитей. С уве-

личением времени напыления до 6–8 мин наблюдается более равномерное покрытие поверхности нитей слоем Au.

Чтобы оценить, насколько эффективно полученные подложки усиливают эффект ГКР, 4-МБК в концентрации 10^{-5} М (раствор в этиловом спирте) был использован в качестве аналита. Для этого небольшой кусочек нетканого материала размером 5×5 мм, на который было напылено золото, помещали в 1 мл раствора 4-МБК на 30 мин, после чего промывали подложку этиловым спиртом. Такой процесс инкубации с высокой вероятностью обеспечивал прочное

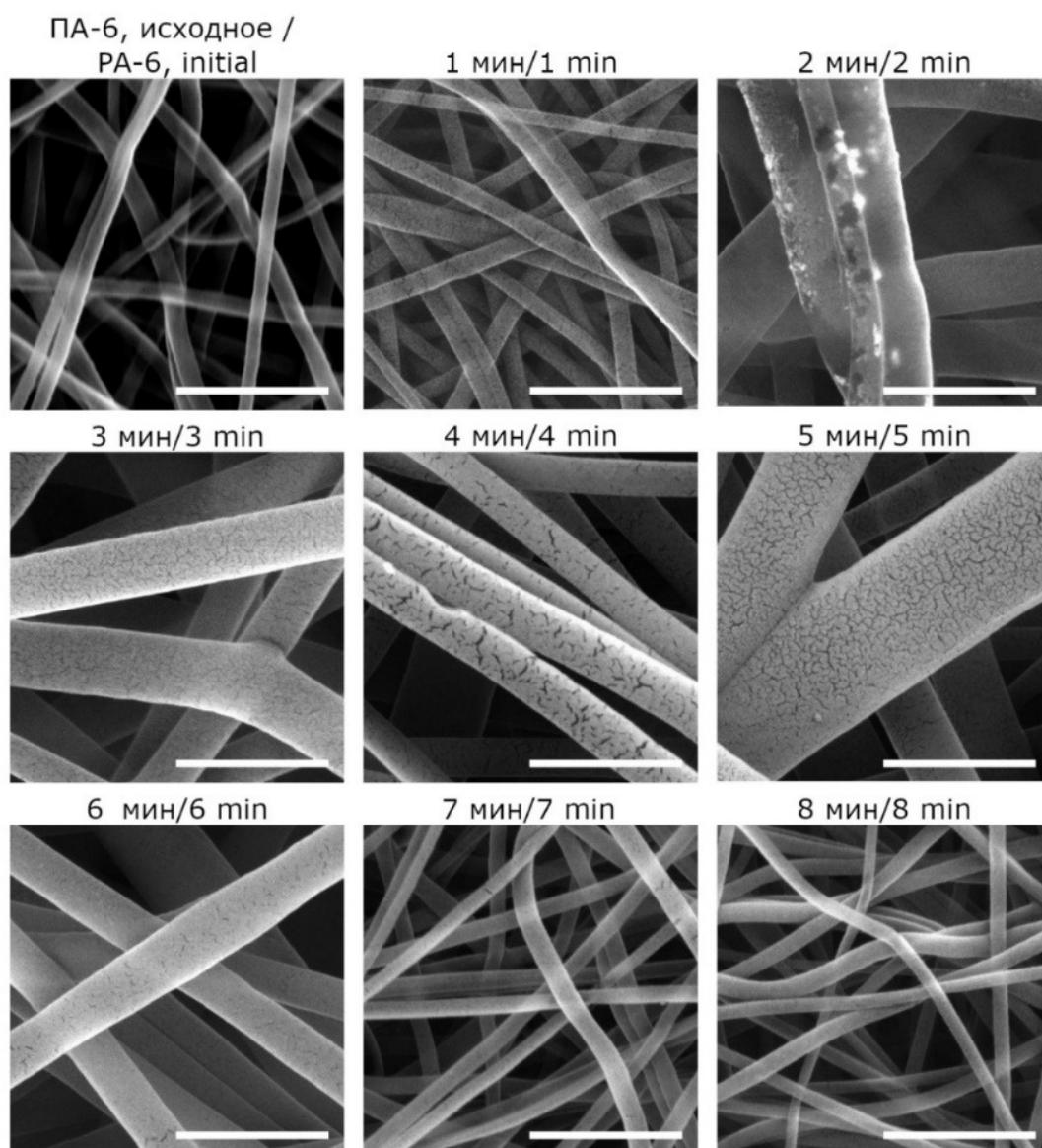


Рис. 1. Изображения СЭМ подложки ПА-6 без нанесения длительного напыления Au (кадр исходное) и после 1–8 мин напыления Au (время указано сверху каждого кадра). Масштабный отрезок 1 мкм

Fig. 1. SEM images of the PA-6 substrate, both before (initial) and after applying gold for 1 to 8 minutes. Scalebar is 1 μ m



связывание (за счёт образования $-S-$) молекул исследуемого вещества (4-МБК) с покрытой золотом поверхностью разрабатываемых подложек ГКР. Измерение проводилось после того, как образцы полностью высохли. С каждой подложки была зарегистрирована карта распределения ГКР сигнала 4-МБК размером 50×50 точек. Таким образом, общий объём анализируемого набора данных составил 9 подложек по 2500 спектров ГКР.

Для проведения интегральной оценки полученных данных (безотносительно интенсивности какой-либо конкретной полосы ГКР) был использован метод анализа главных компонент ГК (РС). При проведении измерений одного аналита данный подход позволяет выявить наиболее характерный спектр ГК1 (РС1) для всего набора данных и, впоследствии, посчитать счета – множители при ГК1 при разложении спектров ГКР на линейную комбинацию главных компонент. При проведении измерений одного аналита данный подход позволяет выявить наиболее характерный спектр ГК1 для всего набора данных (рис. 2, а) и, впоследствии, посчитать счета – множители при ГК1 (рис. 2, б) при разложении спектров ГКР на линейную комбинацию главных компонент.

Поскольку измеряемая концентрация аналита была достаточно низкой, данные оказались достаточно зашумлёнными, что сказалось на доле объяснённой дисперсии. Для ГК1 она оказалась 54.3% (см. рис. 2, а). Получившаяся зависимость счетов ГК1 (PC1 scores) от времени напыления

Au на поверхность ПА-6 оказалась немонотонно возрастающей, приходящей к наибольшим значениям при времени напыления 8 мин (см. рис. 2, б).

Существует ряд других подходов к уменьшению размерности в данных, таких как стохастическое вложение соседей с t -распределением (t -distributed Stochastic Neighbor Embedding, SNE), однако в данном случае такой подход не добавляет информативности. Хотя t -SNE позволяет уменьшить размерность данных до 2, нельзя извлечь информацию о спектральной характеристике каждого из компонентов по-отдельности.

С другой стороны, аналогичные спектры компонент были получены при применении факторного анализа (ФА; factor analysis, FA) к полученным спектрам (рис. 3). В этом случае образцы, полученные при длительности напыления золота 2–4 минуты, также обладали схожими спектральными характеристиками (рис. 3, б).

Чтобы сравнить спектр ГК1 с усредненными спектрами 4-МБК, полученными на разрабатываемых подложках, и убедиться, что подложка, полученная при напылении Au в течение 8 минут, позволяет получить наиболее интенсивный сигнал аналита, были рассчитаны средние спектры и стандартные отклонения (рис. 4, а). На всех типах разрабатываемых подложек спектры ГКР были схожими, за исключением интенсивности: наблюдались полосы 1073 см^{-1} (дыхательная мода колебаний ароматического кольца, симметричный изгиб C–H в плоскости, растяжение C–S) и 1581 см^{-1} (растяжение C–C, асимметричный

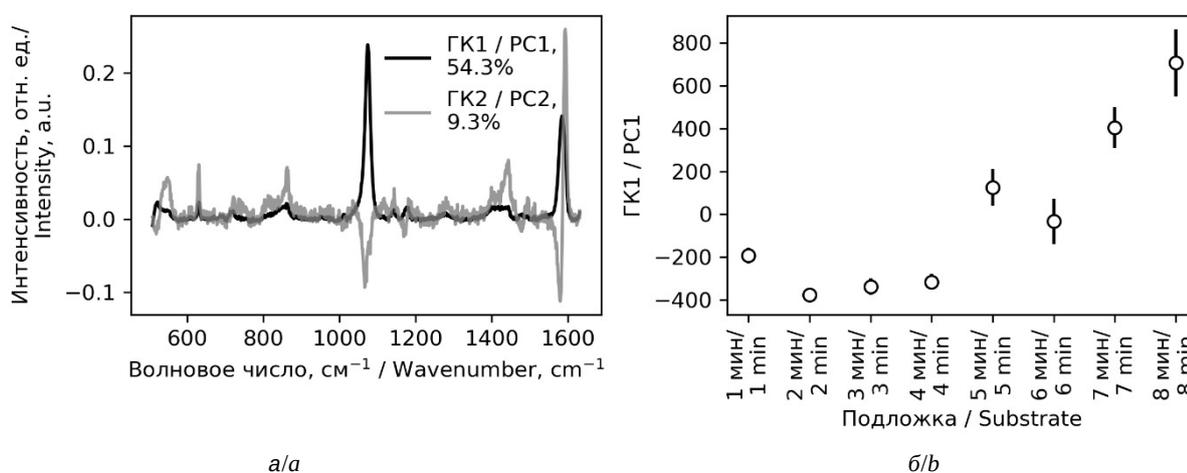


Рис. 2. Спектры ГКР, соответствующие ГК1 и ГК2. Доля дисперсии данных указана в процентах (а). Счета ГК1 для подложек ПА-6 с разным временем депонирования Au (б). Объём выборки – 2500 спектров ГКР раствора 4-МБК (10^{-5} М) на подложку

Fig. 2. SERS spectra corresponding to PC1 and PC2 (a). The explained variance ratio is annotated. PC1 scores for PA-6 substrates with different Au deposition time (b). Dataset size is 2500 SERS spectra of 4-MBA (10^{-5} M) per substrate

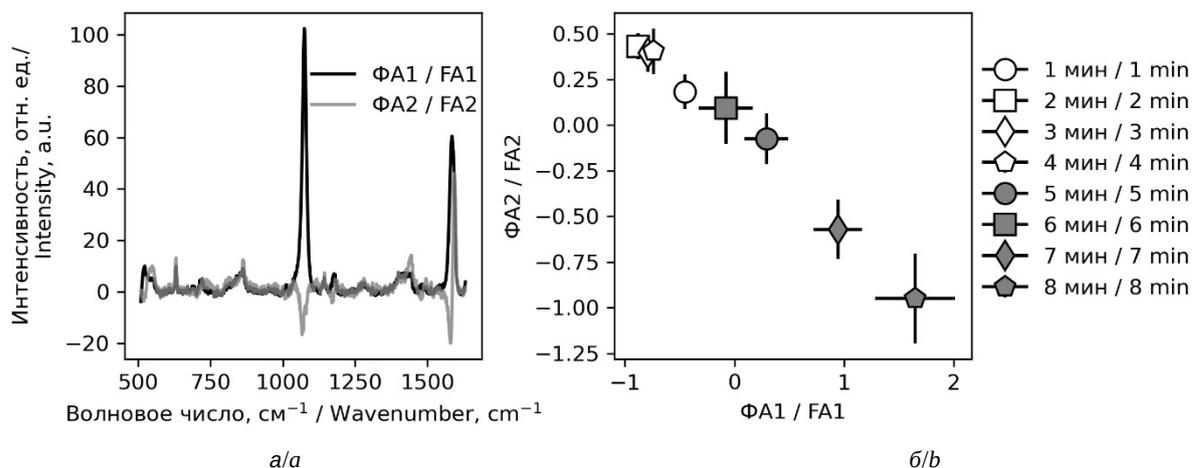


Рис. 3. Спектры ГКР, соответствующие ФА1 и ФА2 (а). Счета ФА1 и ФА2 для подложек ПА-6 с разным временем депонирования Au (б). Объём выборки 2500 спектров ГКР 4-МБК (10^{-5} М) на подложку

Fig. 3. SERS spectra corresponding to FA1 and FA2 (a). FA1/FA2 scores for PA-6 substrates with different Au deposition time (b). Dataset size is 2500 SERS spectra of 4-MBA (10^{-5} M) per substrate

изгиб в плоскости C–H) [38]. Для более точной оценки интенсивности каждой из колебательных полос, была произведена аппроксимизация кривой по формуле (1), позволяя получить параметры положения пика, полуширины на полувысоте и интенсивности. Данный подход подтвердил,

что наилучшие результаты были получены для ПА-6 после 8 мин напыления золота (рис. 4, б).

Для количественной оценки эффективности подложек был рассчитан коэффициент усиления EF по формуле (2). Поскольку EF необходимо вычислять относительно базового значения,

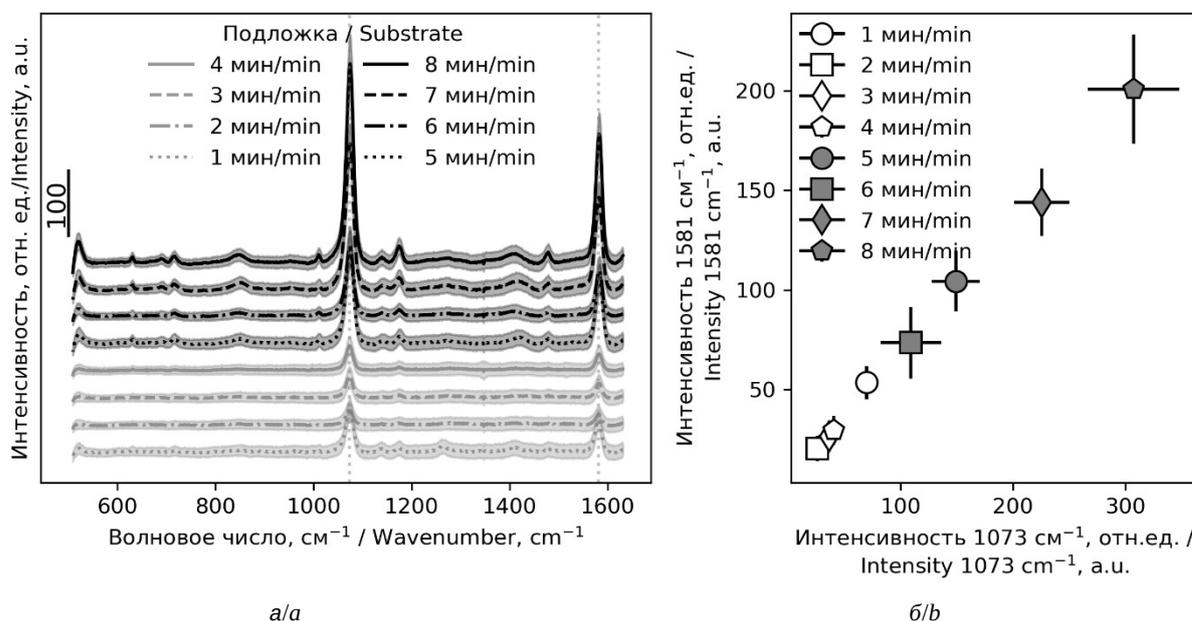


Рис. 4. Средние спектры ГКР раствора 4-МБК (10^{-5} М) со стандартными отклонениями (а). Объём выборки 2500 спектров на подложку. Параметры измерений: длина волны лазера 785 нм, мощность лазера 0.1%, время получения спектра 0.5 с. Вертикальные пунктирные линии соответствуют полосам 1073 и 1581 cm^{-1} . Интенсивности полос 1073 и 1581 cm^{-1} , полученные путём аппроксимации с помощью функции Лоренца (б)

Fig. 4. Mean SERS spectra of 4-MBA (10^{-5} M) with standard deviations (a). Dataset size is 2500 SERS spectra per substrate. Measurement parameters: laser wavelength is 785 nm, laser power is 0.1%, spectrum acquisition time is 0.5 s. Vertical dotted lines correspond to the bands 1073 and 1581 cm^{-1} . Intensities of 1073 and 1581 cm^{-1} bands calculated based on Lorentz function (b)



интенсивности сигнала аналита без подложки ГКР, были зарегистрированы спектры КР 4-МБК в концентрации 10^{-3} М на ПА-6 без напылённого золота (рис. 5, а). Формула для расчёта EF позволяет учитывать разницу в концентрациях аналита, мощности лазера и времени регистрации единичного спектра, поскольку зачастую данные параметры отличаются при измерениях спектров КР и ГКР. Величина EF рассчитана как для полосы 1073 см^{-1} , так и для 1581 см^{-1} (рис. 5, б).

График зависимости коэффициента эффективности EF от времени напыления Au (рис. 5, б) оказался похож на результаты оценки по шкале ГК1 (PC1 scores) (см. рис. 2, б), что подтверждает обоснованность использования такого показателя в качестве интегрального. Максимальный коэффициент EF наблюдался для полосы 1073 см^{-1} при времени напыления 8 мин, и составил $(7.70 \pm 1.02) \cdot 10^4$.

Другим важным критерием для подложек ГКР является воспроизводимость усиления как по поверхности одной подложки, так и между разными подложками, полученными одинаковыми методами. С этой целью было создано 3 подложки с одинаковым временем напыле-

ния Au (8 мин), однако, процесс напыления производился через металлическую маску с регулярными квадратными отверстиями размером 3×3 мм. Фото полученной регулярной структуры на поверхности нетканого материала ПА-6 продемонстрировано на рис. 6, а. Процедура добавления аналита на подобную регулярную структуру была аналогична подложкам со сплошным напылением Au: со-инкубация в спиртовом растворе 4-МБК в концентрации 10^{-5} М в течение 30 мин, однократная промывка этиловым спиртом и сушка на воздухе. Далее на каждой из трех подложек были выбраны 3 отдельные ячейки, на каждой из которых было зарегистрировано по 3 карты 50×50 точек. Средние спектры ГКР со стандартными отклонениями на каждую отдельную ячейку (3 карты 50×50 точек – это 7500 спектров ГКР) представлены на рис. 6, б. Далее на основе полученных спектральных данных был рассчитан и усреднён для каждой повторности подложки коэффициент EF (рис. 6, в). Каждое значение КУ (EF) было вычислено на основе 22500 спектров ГКР (3 ячейки по 3 карты, 50×50 точек каждая). Таким образом, КУ для полосы 1073 см^{-1} для каждой подложки составили: $(7.57 \pm 1.60) \cdot 10^4$; $(7.68 \pm 1.96) \cdot 10^4$; $(7.87 \pm$

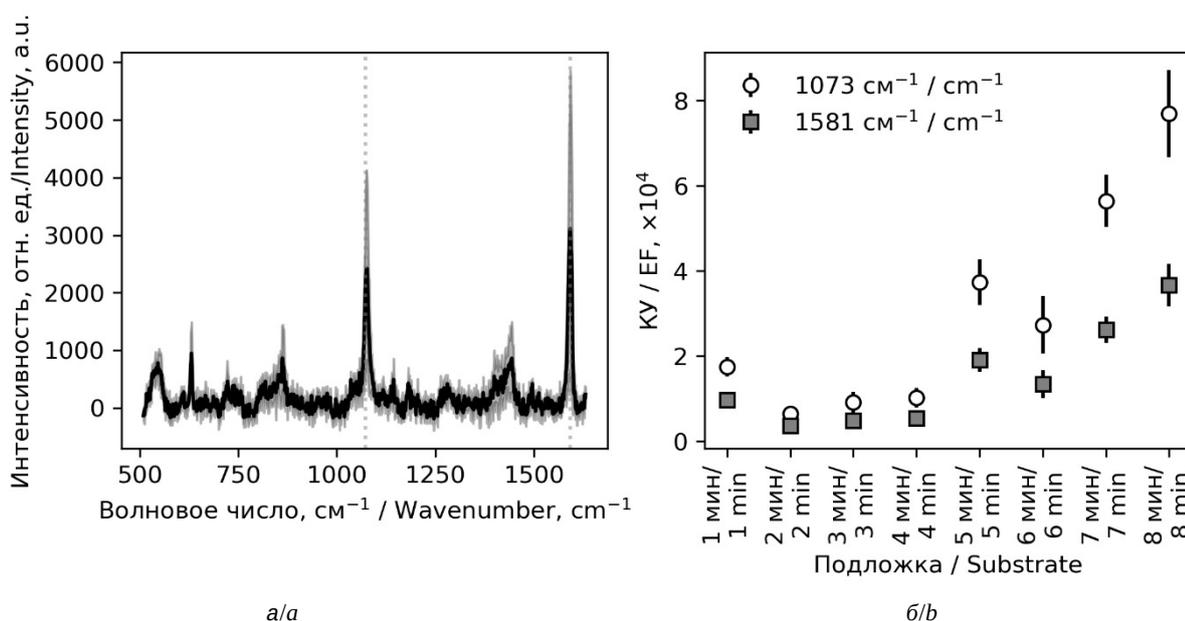


Рис. 5. Средний спектр КР ($n = 5$) 4-МБК (10^{-3} М) со стандартным отклонением. Параметры измерений: длина волны лазера 785 нм, мощность лазера 10%, время получения спектра 30 с. Вертикальные пунктирные линии соответствуют полосам 1073 и 1581 см^{-1} (а). Коэффициенты усиления, посчитанные для полос 1073 и 1581 см^{-1} (среднее значение и стандартное отклонение) (б)

Fig. 5. Mean Raman spectrum ($n = 5$) of 4-MBA (10^{-3} M) with standard deviation (a). Measurement parameters: laser wavelength is 785 nm, laser power is 10%, spectrum acquisition time is 30 s. Vertical dotted lines correspond to the bands 1073 and 1581 см^{-1} (a). EF calculated for the bands 1073 and 1581 см^{-1} (mean and standard deviation) (b)

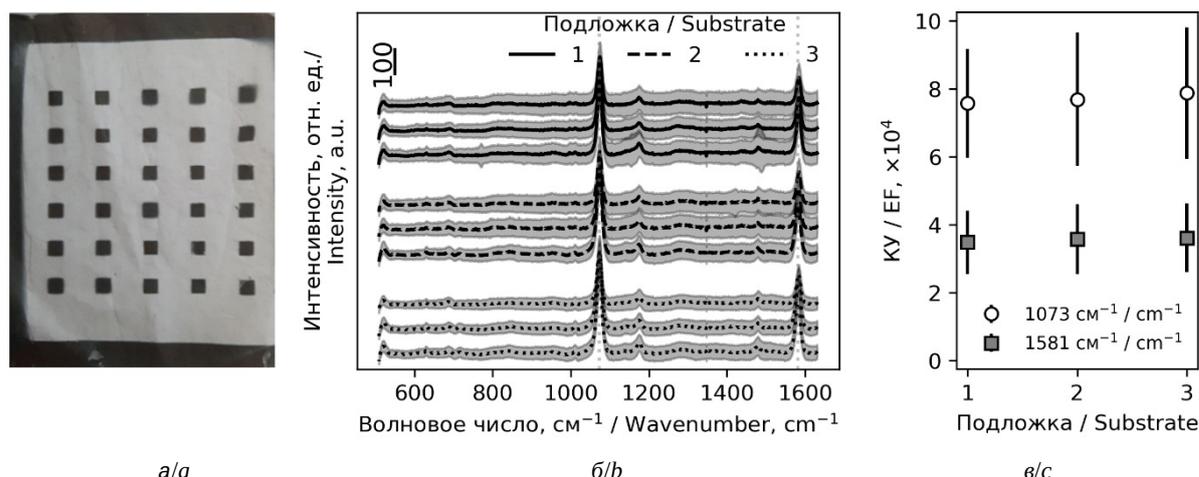


Рис. 6. Фотография подложки ПА-6 после напыления Au в течение 8 мин через маску с квадратными отверстиями 3×3 мм (а). Проверка воспроизводимости: 3 подложки по три ячейки с тремя картами. Средние спектры ГРП 4-МБК (10⁻⁵ М) со стандартными отклонениями для отдельных ячеек. Вертикальные пунктирные линии соответствуют полосам 1073 и 1581 см⁻¹ (б). Коэффициент усиления для полос 1073 и 1581 см⁻¹, среднее значение и стандартное отклонение для каждой подложки (в)

Fig. 6. Photo of PA-6 substrate after 8 min Au deposition through mask with 3×3 mm rectangular holes (a). Reproducibility test. 3 maps 50×50 (2500 SERS spectra) per 3 areas per 3 separate substrates. Mean SERS spectra of 4-MBA (10⁻⁵ M) with standard deviations of separate areas (3 maps 50×50 = 7500 SERS spectra). Vertical dotted lines correspond to the bands 1073 and 1581 cm⁻¹ (b). EF calculated for the bands 1073 and 1581 cm⁻¹ (mean and standard deviation) per separate substrates (3 maps 50×50 per 3 areas = 22500 SERS spectra) (c)

± 1.93)·10⁴ соответственно, а относительные стандартные отклонения были 21.1, 25.5 и 24.5% соответственно. Средние показатели для трех подложек: коэффициент усиления (7.71 ± 1.84)·10⁴, относительное стандартное отклонение 23.9%.

Заключение

В ходе работы были разработаны подложки для гигантского комбинационного рассеяния на основе нетканого материала полиамид-6 с вакуумным напылением золота. Исследовано влияние времени напыления (1–8 мин) на морфологию поверхности и усиление сигнала ГРП на примере 4-меркаптобензойной кислоты в концентрации 10⁻⁵ М. СЭМ-анализ показал, что увеличение времени напыления до 6–8 мин способствует более равномерному покрытию нитей ПА-6 слоем Au, тогда как при малых временах (2–4 мин) наблюдались локальные дефекты. Наибольший коэффициент усиления для полосы 1073 см⁻¹ был получен при времени напыления 8 мин, он составил (7.70 ± 1.02)·10⁴. Оценка воспроизводимости проводилась на трёх идентичных подложках с напылением Au в течение 8 мин. На каждой подложке было зарегистрировано по 9 карт ГРП (50×50 точек). Полученный коэффициент усиления составил (7.71 ± 1.84)

× 10⁴ с относительным стандартным отклонением ~23.9%. В ходе исследования удалось оптимизировать процедуру получения эффективных ГРП подложек методом вакуумного напыления Au на поверхность нетканого материала ПА-6. Полученные результаты демонстрируют перспективность использования таких подложек для детектирования низких концентраций аналитов.

Список литературы / References

- Nie S., Emory S. R. Probing single molecules and single nanoparticles by surface-enhanced Raman scattering. *Science*, 1997, vol. 275, no. 5303, pp. 1102–1106. <https://doi.org/10.1126/science.275.5303.1102>
- Kneipp K., Wang Y., Kneipp H., Perelman L. T., Itzkan I., Dasari R. R., Feld M. S. Single molecule detection using surface-enhanced Raman scattering (SERS). *Phys. Rev. Lett.*, 1997, vol. 78, pp. 1667–1670. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1667>
- Chen Q., Wang J., Yao F., Zhang W., Qi X., Gao X., Liu Y., Wang J., Zou M., Liang P. A review of recent progress in the application of Raman spectroscopy and SERS detection of microplastics and derivatives. *Microchimica Acta*, 2023, vol. 190, art. 465. <https://doi.org/10.1007/s00604-023-06044-y>
- Kaushik A., Singh J., Soni R., Singh J. P. MoS₂-Ag nanocomposite-based SERS substrates with an ultralow detection limit. *ACS Appl. Nano Mater.*, 2023, vol. 6,



- iss. 11, pp. 9236–9246. <https://doi.org/10.1021/acsnm.3c00813>
5. Itoh T., Procházka M., Dong Z. C., Ji W., Yamamoto Y. S., Zhang Y., Ozaki Y. Toward a new era of SERS and TERS at the nanometer scale: From fundamentals to innovative applications. *Chem. Rev.*, 2023, vol. 123, iss. 4, pp. 1552–1634. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00316>
 6. Chaudhry I., Hu G., Ye H., Jensen L. Toward modeling the complexity of the chemical mechanism in SERS. *ACS Nano*, 2024, vol. 18, iss. 32, pp. 20835–20850. <https://doi.org/10.1021/acsnano.4c07198>
 7. Fleischmann M., Hendra P. J., McQuillan A. J. Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. *Chem. Phys. Lett.*, 1974, vol. 26, iss. 2, pp. 163–166. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(74\)85388-1](https://doi.org/10.1016/0009-2614(74)85388-1)
 8. Jeanmaire D. L., Van Duyne R. P. Surface raman spectroelectrochemistry: Part I. Heterocyclic, aromatic, and aliphatic amines adsorbed on the anodized silver electrode. *J. Electroanal. Chem.*, 1977, vol. 84, iss. 1, pp. 1–20. [https://doi.org/10.1016/S0022-0728\(77\)80224-6](https://doi.org/10.1016/S0022-0728(77)80224-6)
 9. Albrecht M. G., Creighton J. A. Anomalously intense Raman spectra of pyridine at a silver electrode. *J. Am. Chem. Soc.*, 1977, vol. 99, iss. 15, pp. 5215–5217. <https://doi.org/10.1021/ja00457a071>
 10. Sultangaziyev A., Ilyas A., Dyussupova A., Bukasov R. Trends in application of SERS substrates beyond Ag and Au, and their role in bioanalysis. *Biosensors*, 2022, vol. 12, iss. 11, art. 967. <https://doi.org/10.3390/bios12110967>
 11. Tahir M. A., Dina N. E., Cheng H., Valev V. K., Zhang L. Surface-enhanced Raman spectroscopy for bioanalysis and diagnosis. *Nanoscale*, 2021, vol. 13, iss. 27, pp. 11593–11634. <https://doi.org/10.1039/D1NR00708D>
 12. Li J. Q., Dukes P. V., Lee W., Sarkis M., Vo-Dinh T. Machine learning using convolutional neural networks for SERS analysis of biomarkers in medical diagnostics. *J. Raman Spectrosc.*, 2022, vol. 53, no. 12, pp. 2044–2057. <https://doi.org/10.1002/jrs.6447>
 13. Liu X., Guo J., Li Y., Wang B., Yang S., Chen W., Wu X., Guo J., Ma X. SERS substrate fabrication for biochemical sensing: Towards point-of-care diagnostics. *J. Mater. Chem. B*, 2021, vol. 9, iss. 40, pp. 8378–8388. <https://doi.org/10.1039/D1TB01299A>
 14. Yang J., Chen X., Luo C., Li Z., Chen C., Han S., Lv X., Wu L., Chen C. Application of serum SERS technology combined with deep learning algorithm in the rapid diagnosis of immune diseases and chronic kidney disease. *Sci. Rep.*, 2023, vol. 13, no. 1, art. 15719. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-42719-5>
 15. Lyu N., Hassanzadeh-Barforoushi A., Rey Gomez L. M., Zhang W., Wang Y. SERS biosensors for liquid biopsy towards cancer diagnosis by detection of various circulating biomarkers: Current progress and perspectives. *Nano Converg.*, 2024, vol. 11, art. 22. <https://doi.org/10.1186/s40580-024-00428-3>
 16. Cheng H., Chen R., Zhan Y., Dong W., Chen Q., Wang Y., Zhou P., Gao S., Huang W., Li L., Feng J. Novel ratiometric surface-enhanced Raman scattering (SERS) biosensor for ultrasensitive quantitative monitoring of human carboxylesterase-1 in hepatocellular carcinoma cells using Ag–Au nanoflowers as SERS substrate. *Anal. Chem.*, 2024, vol. 96, iss. 46, pp. 18555–18563. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.4c04763>
 17. Oliveira D., Carneiro M. C. C. G., Moreira F. T. C. SERS biosensor with plastic antibodies for detection of a cancer biomarker protein. *Microchim. Acta*, 2024, vol. 191, art. 238. <https://doi.org/10.1007/s00604-024-06327-y>
 18. Du Z., Qi Y., He J., Zhong D., Zhou M. Recent advances in applications of nanoparticles in SERS *in vivo* imaging. *WIREs Nanomedicine and Nanobiotechnology*, 2021, vol. 13, iss. 2, art. e1672. <https://doi.org/10.1002/wnan.1672>
 19. Bagheri P., Eremina O. E., Fernando A., Kamal M., Stegis I., Vazquez C., Shishido S. N., Kuhn P., Zavaleta C. A Systematic Approach toward Enabling Maximal Targeting Efficiency of Cell Surface Proteins with Actively Targeted SERS Nanoparticles. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2024, vol. 16, iss. 13, pp. 15847–15860. <https://doi.org/10.1021/acsmi.3c18959>
 20. Berge M., Doweck A., Prognon P., Legrand F. X., Tfayli A., Lê L. M. M., Caudron E. Optimization of experimental conditions by surface enhanced Raman Scattering (SERS) spectroscopy with gold nanoparticles suspensions. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2022, vol. 268, art. 120628. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120628>
 21. Yang Q., Sun D.-W., Pu H. Porous materials nanohybridized with metal nanoparticles as substrates for enhancing SERS detection in food safety applications. *Trends Food Sci. Technol.*, 2023, vol. 141, art. 104202. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2023.104202>
 22. Feizpour M., Liu Q., Van der Donck T., Thienpont H., Meulebroeck W., Ottevaere H. Characterizing planar SERS substrates: Unraveling the link between physical characteristics and performance metrics. *J. Phys. Photonics*, 2024, vol. 6, iss. 2, art. 025002. <https://doi.org/10.1088/2515-7647/ad2528>
 23. Jin J., Guo Z., Fan D., Zhao B. Spotting the driving forces for SERS of two-dimensional nanomaterials. *Mater. Horizons*, 2023, vol. 10, iss. 4, pp. 1087–1104. <https://doi.org/10.1039/D2MH01241C>
 24. Liu Y., Qin Z., Deng J., Zhou J., Jia X., Wang G., Luo F. The Advanced Applications of 2D Materials in SERS. *Chemosensors*, 2022, vol. 10, iss. 11, art. 455. <https://doi.org/10.3390/chemosensors10110455>
 25. Prikhozhenko E. S., Bratashov D. N., Gorin D. A., Yashchenok A. M. Flexible surface-enhanced Raman scattering-active substrates based on nanofibrous membranes. *Nano Res.*, 2018, vol. 11, pp. 4468–4488. <https://doi.org/10.1007/s12274-018-2064-2>
 26. Wang L., Wang X., Cheng L., Ding S., Wang G., Choo J., Chen L. SERS-based test strips: Principles, designs and applications. *Biosens. Bioelectron.*, 2021, vol. 189, art. 113360. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2021.113360>
 27. Sheng E., Lu Y., Xiao Y., Li Z., Wang H., Dai Z. Simultaneous and ultrasensitive detection of three pesticides using a surface-enhanced Raman scattering-based lateral flow assay test strip. *Biosens. Bioelectron.*, 2021,



- vol. 181, art. 113149. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2021.113149>
28. Soden D., Taqy S., Ghosh K., Haque A. A tunable approach to fabricate cost-effective SERS substrates using Au nanoparticles by sputtering deposition. *Bull. Mater. Sci.*, 2025, vol. 48, art. 30. <https://doi.org/10.1007/s12034-024-03395-x>
 29. Nguyen T. H. T., Nguyen T. M. A., Sai C. D., Le T. H. Y., Tran T. N. A., Bach T. C., Le V. V., Pham N. H., Ngac A. B., Nguyen V. T., Tran T. H., Chi T. H. K. Efficient surface enhanced Raman scattering substrates based on complex gold nanostructures formed by annealing sputtered gold thin films. *Opt. Mater.*, 2021, vol. 121, art. 111488. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111488>
 30. Metwally B. S., Zayed A. M., Rashed S. A., El-Sheikh M. N., Hamouda A. S. Sustainable nano-nonwoven fabric production from recycled polyamide 6 waste via electrospinning: Controlling characteristics and comprehensive analytical study. *Adv. Mater. Technol.*, 2023, vol. 8, iss. 18, art. 2300509. <https://doi.org/10.1002/admt.202300509>
 31. Mahmud M. B., Rahman S. S., Fashandi M., Lee P. C., Park C. B. Hydrophilic-to-hydrophobic conversion of polyamide 6-based mat via polyvinylidene fluoride nanofiber integration with enhanced oil-water separation. *Mater. Today Sustain.*, 2023, vol. 24, art. 100559. <https://doi.org/10.1016/j.mtsust.2023.100559>
 32. Lasenko I., Sanchaniya J. V., Kanukuntla S. P., Ladani Y., Viluma-Gudmona A., Kononova O., Luis V., Tipans I., Selga T. The mechanical properties of nanocomposites reinforced with PA6 electrospun nanofibers. *Polymers*, 2023, vol. 15, iss. 3, art. 673. <https://doi.org/10.3390/polym15030673>
 33. Yingying H., Jiangtao X., Sihang Z., Zhichao L., Dagan M., Shouxiang J. Au-coated quartz fabric by plasma treatment as a flexible SERS substrate for rapid detection of harmful substances. *Microchem. J.*, 2024, vol. 196, art. 109700. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.109700>
 34. Wang K., Li J. Reliable SERS detection of pesticides with a large-scale self-assembled Au@4-MBA@Ag nanoparticle array. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2021, vol. 263, art. 120218. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120218>
 35. Klimova S. A., Atkin V. S., Usachev A. N., Pchelkin I. A., Presnyakov D. V., Mitin D. M., Savonin A. A., Kirillova I. V. Metallized nonwoven electrospun polyamide-6 nanofibers for energy production and storage. *Fibre Chem.*, 2017, vol. 49, no. 3, pp. 200–204. <https://doi.org/10.1007/s10692-017-9869-8>
 36. Saveleva M., Prikhozhdenko E., Gorin D., Skirtach A. G., Yashchenok A., Parakhonskiy B. Polycaprolactone-based, porous CaCO₃ and Ag nanoparticle modified scaffolds as a SERS platform with molecule-specific adsorption. *Front. Chem.*, 2020, vol. 7, art. 888. <https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00888>
 37. Pedregosa F., Varoquaux G., Gramfort A., Michel V., Thirion B., Grisel O., Blondel M., Prettenhofer P., Weiss R., Dubourg V., Vanderplas J., Passos A., Cournapeau D., Brucher M., Perrot M., Duchesnay É. Scikit-learn: Machine learning in Python. *J. Mach. Learn. Res.*, 2011, vol. 12, pp. 2825–2830. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1201.0490>
 38. Ho C. H., Lee S. SERS and DFT investigation of the adsorption behavior of 4-mercaptobenzoic acid on silver colloids. *Colloids Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*, 2015, vol. 474, pp. 29–35. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2015.03.004>

Поступила в редакцию 05.05.2025; одобрена после рецензирования 10.06.2025; принята к публикации 11.07.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 05.05.2025; approved after reviewing 10.06.2025; accepted for publication 11.07.2025; published 31.03.2026



ИЗ ИСТОРИИ ФИЗИКИ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 112–127
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 112–127
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-112-127>, EDN: ZLOWPE

Научная статья
УДК 621.039.5(092)

Академик Федор Михайлович Митенков: саратовские годы биографии

В. М. Аникин

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

Аникин Валерий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиотехники и электродинамики Института физики, AnikinVM@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6506-6997>, AuthorID: 166229

Аннотация. Статья посвящена саратовскому периоду жизни академика Российской академии наук Федора Михайловича Митенкова (1924–2016), ученого с мировым именем в области атомной энергетики, одного из «творцов ядерного века». Его родители специально переехали из глубинки области в Саратов, чтобы дать детям образование. Федор Митенков с отличием окончил школу в 1941 г. и поступил на первый курс физико-математического факультета Саратовского университета. С 1942 г. находился на армейской службе. Был восстановлен на второй курс физического факультета СГУ в 1946 г. Проявил упорство в преодолении трудных жизненных обстоятельств, продемонстрировал выдающиеся способности к учебе и научной работе. Параллельно получил диплом заочного юридического института. После завершения учебы в университете он по решению специальной комиссии Первого Главного управления при Совете министров СССР был распределен на закрытое предприятие атомного энергомашиностроения в г. Горький. При написании статьи использованы данные личного дела Ф. М. Митенкова, хранящегося в архиве Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, воспоминания его однокурсников и коллег, а также его собственные воспоминания. Ф. М. Митенков высоко ценил знания, полученные во время учебы в университете, которые стали теоретическим фундаментом для его последующей творческой деятельности в области конструирования атомных энергетических установок и систем, выработки стратегии научной, организаторской, методологической и конструкторской деятельности по созданию надежных устройств атомной энергетики.

Ключевые слова: Митенков Федор Михайлович, атомная энергетика, Саратовский государственный университет

Для цитирования: Аникин В. М. Академик Федор Михайлович Митенков: саратовские годы биографии // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 112–127. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-112-127>, EDN: ZLOWPE

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

Article

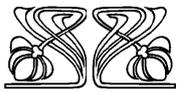
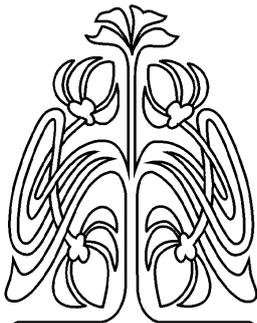
Academician Fyodor M. Mitenkov: Saratov years of the biography

V. M. Anikin

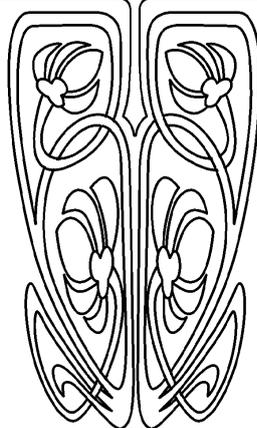
Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Valery M. Anikin, AnikinVM@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6506-6997>, AuthorID: 166229

Abstract. Background and Objectives: This article is dedicated to the Saratov period in the life of Academician of the Russian Academy of Sciences Fyodor Mikhailovich Mitenkov (1924–2016), a world-renowned scientist in the field of nuclear energy and one of the “creators of the nuclear age.” His parents moved from the outback to Saratov specifically to provide their children with an



УНИВЕРСИТЕТСКАЯ
ЛЕТОПИСЬ





education. Fyodor Mitenkov graduated from high school with honors in 1941 and entered the first year of the Physics and Mathematics Department of Saratov University. From 1942, he served in the army. He was reinstated in the second year of the Physics Department of Saratov State University in 1946. He demonstrated perseverance in overcoming difficult life circumstances, demonstrated outstanding academic and research abilities. He also earned a correspondence law degree from the Institute of Law. After graduating from university, by decision of a special commission of the First Main Directorate under the Council of Ministers of the USSR, he was assigned to a closed nuclear power engineering enterprise in the city of Gorky. **Materials and Methods:** This article draws on data from F. M. Mitenkov's personal file, stored in the archives of Saratov State University, the recollections of his classmates and colleagues, and his own memoirs. **Conclusion:** Fyodor M. Mitenkov highly valued the knowledge he gained during his studies at the university, which became the theoretical foundation for his subsequent creative work in the design of nuclear power plants and systems and the development of a strategy for scientific, organizational, methodological, and design work to create reliable nuclear power equipment.

Keywords: Mitenkov Fedor Mikhailovich, nuclear power engineering, Saratov State University

For citation: Anikin V. M. Academician Fyodor M. Mitenkov: Saratov years of the biography. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 112–127 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-112-127>, EDN: ZLOWPE

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

Введение

Академик РАН Федор Михайлович Митенков (1924–2016) – выдающийся ученый, конструктор и специалист в области атомной энергетики с мировым именем. Вся его трудовая жизнь после окончания физического факультета Саратовского государственного университета



Федор Михайлович Митенков

Fyodor M. Mitenkov

в 1950 г. связана с Опытным конструкторским бюро машиностроения (ОКБМ) в Нижнем Новгороде (Горьком). Первоначально ОКБМ имело статус Конструкторского бюро машиностроения (ОКБ) Артиллерийского завода им. И. В. Сталина, переименованного позже в Горьковский машиностроительный завод, а в 1964 г. ОКБ

было преобразовано в самостоятельное предприятие – ОКБМ. В 1969–1997 г. Федор Михайлович – директор и Главный конструктор ОКБМ (с 1988 г. – в звании Генерального конструктора). В 1998 г. Ф. М. Митенков ушел с поста директора по собственному желанию, поскольку в условиях новых экономических реалий в стране совмещение двух должностей стало невозможным. С этого времени Федор Михайлович – научный руководитель ОКБМ (позднее – ОКБМ имени И. И. Африкантова, первого главного конструктора ОКБМ).

Содержание деятельности ОКБМ – проектирование и создание ядерных энергетических установок. Федор Михайлович Митенков непосредственно причастен к разработке и реализации таких проектов, как ядерные энергетические установки с реакторами на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем (БН-350, БН-600, БН-800), судовые атомные паропроизводящие установки для первого атомного ледокола «Ленин» и последующих ледоколов («Арктика», «Сибирь», «Россия», «Советский Союз», «Таймыр», «Вайгач», «Ямал»; лихтеровоз «Севморпуть»), корабельные ядерные установки для подводных лодок и надводных кораблей военно-морского флота, ядерные реакторы для плавучей атомной электростанции. Ф. М. Митенков был инициатором строительства атомных котельных – первых в мире атомных станций теплоснабжения (АСТ). Это направление было бездумно закрыто уже на этапе сооружения первой станции АСТ в Н. Новгороде, причем к моменту закрытия было смонтировано 90% станции.

Настоящая статья посвящена саратовскому периоду жизни Ф. М. Митенкова, учебе в Саратовском университете и первым годам его работы в ОКБ, в течение которых он формировался как специалист по атомной энергетике высочайшего класса. В основу статьи положены



данные из его личного дела, хранящегося в архиве Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, воспоминания его однокурсников и коллег, а также его собственные размышления-воспоминания. Ф. М. Митенков высоко ценил знания, полученные во время учебы в университете. В его научных публикациях и книгах осмыслен сохраняющий актуальность для современного этапа развития атомной энергетики многолетний опыт научной, организаторской, методологической и конструкторской деятельности по созданию надежных устройств атомной энергетики.

Семейная среда

Федор Михайлович Митенков родился 25 ноября 1924 г. в селе Ключи, которое по современному административному делению относится к Базарно-Карабулакскому району Саратовской области¹. В том же селе родились и начинали свой жизненный путь и его родители. Семья была многодетной – два сына и две дочери. В своей книге воспоминаний «Размышления о пережитом» [1] Федор Михайлович описание первых 26 лет своей жизни выделит в специальный очерк, где он так говорил о своих родителях:

«Отец мой, Митенков Михаил Сергеевич, окончил церковно-приходскую школу. Будучи призван незадолго перед Первой мировой войной в царскую армию, он был направлен в армейское медицинское училище, которое и закончил, получив квалификацию медицинского фельдшера. Вся дальнейшая его жизнь была связана с медициной.

Моя мать, Евдокия Захаровна (в девичестве – Давыдова), была из семьи староверов и строго придерживалась этой веры всю свою жизнь, никакого образования не имела. <...>

Насколько я помню, семья всегда очень сильно материально нуждалась. Кормилец был только один – отец. <...> Остается совершенно непонятным, как родителям удавалось сводить концы с концами, тем более что они отличались такой добродетелью как помощь ближнему. В голодные годы в Поволжье родственники часто обращались к ним за помощью, и мать всегда находила возможность чем-то помочь, не допускала отказа. <...>

¹История села Ключи, социальной особенностью которого, в частности, было наличие старообрядческой общины, уходит корнями в XVIII в. В 1935–1958 гг. оно входило в Куриловский район Саратовской области (с центром в с. Вязовка), который при упразднении был разделен между тремя районами области – Базарно-Карабулакским, Балтайским и Вольским. Об истории с. Ключи см.: Большая Саратовская энциклопедия. Ключи – село в Базарно-Карабулакском районе. URL: <https://saratovregion.ucoz.ru/region/b-karabulakskiy/kluchi.htm> (дата обращения: 05.09.2025).

²Подобные случаи, когда родители специально «привязывали» местожительство семьи к Саратову, имели место и в биографиях ряда других студентов и выпускников физического факультета СГУ, ставших широко известными людьми (см., например, [3–5]).

³Номер школы менялся неоднократно (в том числе в процессе строительства). Последние две нумерации – школа № 96 и лицей № 2.

Меня не перестает и сейчас удивлять, что в этих сложнейших условиях отец определил для себя цель – дать своим детям достаточное образование. Всю свою последующую жизнь он подчинил этой цели. И не раз в дальнейшем мне приходилось слышать, как отец, обсуждая какую-либо особенно трудную ситуацию с семейным бюджетом, заканчивал словами: «Мать, как бы трудно ни было, дети должны учиться. Мы должны найти выход». И ведь находили!» [1, с. 9, 10].



Михаил Сергеевич и Евдокия Захаровна Митенковы, 1940-е гг. [1]

Mikhail Sergeevich and Evdokiya Zakharovna Mitenkovs, 1940s [1]

Школьные годы

В первый класс Федор Митенков пошел «досрочно», вместе с сестрой, которая была старше его на два года [1, с. 10]. В архиве Саратовского университета хранится личное дело студента Ф. М. Митенкова, из которого можно уточнить некоторые детали биографии, относящиеся к его детским и юношеским годам [2]. В начальных классах начиная с 1931 г. он обучался в школе с. Чернышево Новобурасского района Саратовской области [2, л. 2], где был принят в пионеры. Затем отец, следуя поставленной цели, – учить детей, перевез семью в Саратов², чтобы «дети могли учиться и в школе, и в институте без отрыва от дома, от семьи». Жить в Саратове Митенковы стали в пос. Агафоновка (9-я линия, д. 80), а обучение Федор продолжил в 3-й средней школе РУЖД³. Ф. М. Митенков вспоминал:



«Переход в городскую школу для меня лично был весьма важным событием, поскольку обстановка там сильно отличалась от спокойной, напоминающей домашнюю, обстановки в сельской школе. Первые месяцы учебы в городской школе, по-видимому, имели некоторые психологические последствия, которые в дальнейшем переросли в особенности моего характера (некоторая замкнутость, затрудненная коммуникабельность и др.). По сравнению с сельской школой, в городской была довольно хорошая библиотека. Я пристрастился к чтению, стремился побыстрее сделать домашние задания, чтобы больше времени оставалось для чтения. Дело доходило до того, что мать отбирала у меня книги, выключала свет. У меня сложилось впечатление, что большую часть знаний, наиболее интересных, я получал в те годы не из учебников, а из прочитанных книг» [1, с. 10].



Школа, в которой учился Ф. М. Митенков, 1930-е гг.
The school where Fyodor M. Mitenkov studied, 1930s

Учился Федор успешно, в 9–10 классах проявил себя и как активный общественник: в ноябре 1939 г. вступил в комсомол, был классным организатором по подготовке значкистов «Готов к ПВХО»⁴, занимался выпуском классной стенной газеты, был избран секретарем в ученического комитета школы, где вел оборонно-физкультурный отдел [2, л. 2].

Университеты жизни Федора Митенкова

В 1941 г. Ф. М. Митенков с отличием, отмеченным почетной грамотой⁵, окончил школу и планировал поступать в Саратовский университет. В своих воспоминаниях он писал:

«В 1941 году я с отличием окончил среднюю школу и готовился поступать в Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,

но затруднялся с выбором факультета. Физико-математический факультет меня привлекал логической строгостью и стройностью изучаемых дисциплин, а историко-филологический – обширностью информации по общественным событиям, становлению и развитию культуры; кроме того, в какой-то мере при выборе факультета сказывались и мои ученические попытки писать стихи и рассказы.

Но жизнь проблему выбора факультета решила по-своему. 22 июня 1941 года началась Великая Отечественная война. Вместо университета я с близкими друзьями-однокашниками пошел в райвоенкомат, где мы встали в очередь, чтобы нас зачислили в армию и отправили на фронт. Райвоенком на мою просьбу отреагировал так: «Тебе, друг, только 16 лет. Жди, и до тебя дойдет очередь, не забудем».

Мне было крайне обидно, тем более что мои друзья, которые были на два года старше меня и уже закончили учебу в аэроклубе, были оформлены немедленно и получили направление в авиационное училище.

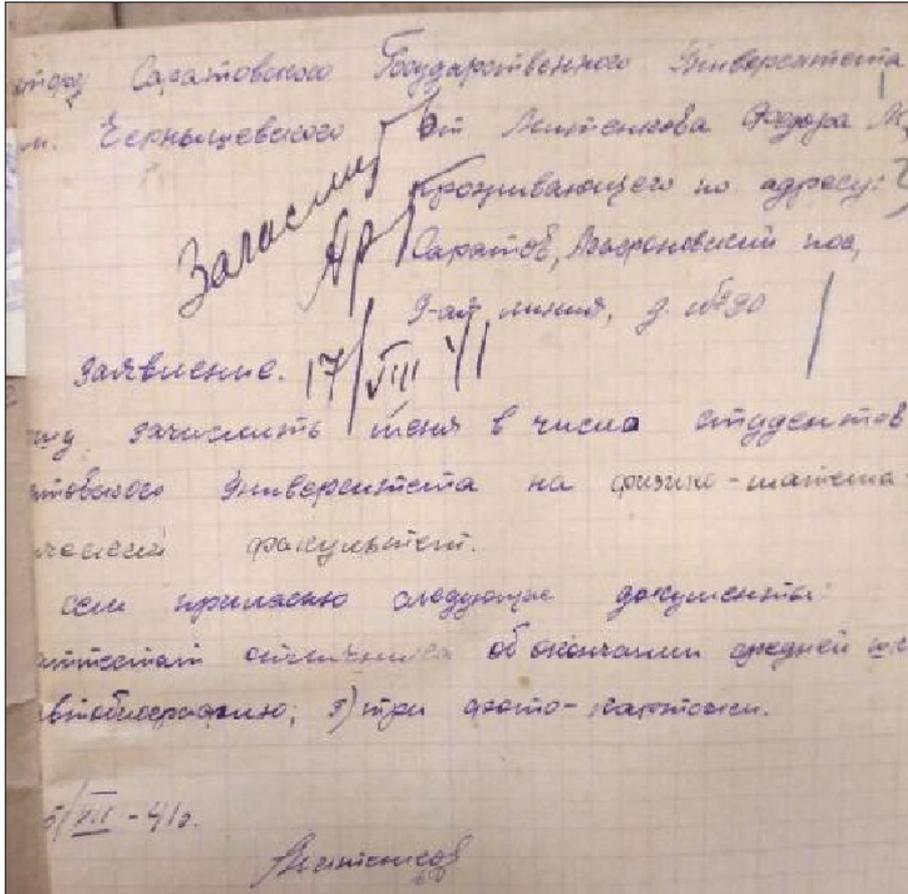
Учиться в университете мне расхотелось, но по настоянию отца я пошел в университет и оформился на физико-математический факультет».

В архиве Саратовского университета сохранилось два документа той поры: заявление Ф. Митенкова с просьбой о зачислении на физико-математический факультет от 5 июля 1941 г. и автобиография, подписанная в день начала Великой Отечественной войны 22 июня 1941 г. Решение о зачислении Ф. М. Митенкова на физико-математический факультет университета было принято 17 августа 1941 г. Интересная для истории университета деталь: виза «Принять» на его заявлении наложена исполняющей обязанности ректора Верой Александровной Артисевич, сменившей 8 июля 1941 г. в этой должности Д. И. Лучинина, ушедшего на фронт.

В связи с исключительной сложностью ситуации занятия у студентов начались в том году только 25 декабря. Лето и осень преподаватели и студенты участвовали в производственных, сельскохозяйственных и оборонных работах. Осенью 1941 г. студенты-физики были направлены на рытье противотанкового рва в районе железнодорожной станции Кологривовка, где вместе с ними работами сельчане и учащиеся

⁴В 1934 г. Центральный совет Общества содействия обороне, авиационному и химическому строительству СССР (Осоавиахим) разработал нормы комплекса «Готов к противовоздушной и противохимической обороне» («Готов к ПВХО»). Комиссия Центрального Исполнительного Комитета СССР учредила нагрудный знак «Готов к ПВХО», призванный способствовать массовости и популяризации движения «Готов к ПВХО». По нормам этого комплекса в стране повсеместно проводились военно-химические соревнования, в которых участвовали сотни тысяч граждан, в том числе школьники.

⁵В СССР золотые и серебряные медали «За отличные успехи и примерное поведение» для выпускников школ были введены подписанным И. В. Сталиным постановлением Совета народных комиссаров СССР от 30 мая 1945 года «Об утверждении положения о золотой и серебряной медалях и образцов аттестата зрелости для оканчивающих среднюю школу». Одновременно были утверждены описание медалей, положение о порядке награждения и форма аттестата зрелости как документа об окончании школы. Школьная медаль в 1940–1950 гг. давала право поступления в вуз без экзаменов.



Заявление Ф. М. Митенкова о приеме в Саратовский университет [2, л. 2]
Application by F. M. Mitenkov for admission to Saratov University [2, sh. 2]

старших классов. Спустя годы Ф. М. Митенков вспоминал:

«Мне, бригадиру участка, не приходилось практически понукать, контролировать тружеников. <...> Так проявлялось коллективное сознание критичности сложившейся ситуации и, как следствие, целенаправленное стремление (в одних случаях осознанное, в других – подсознательное) каждого выполнить порученную работу без проволочек, своевременно и качественно» [1, с. 26].

Зимняя экзаменационная сессия у студентов была перенесена на 15 марта – 1 апреля 1942 г. [6].

Обучение на первом курсе Федор Митенков завершил с отличными оценками. Затем в учебе возник четырехлетний перерыв, связанный с его призывом на воинскую службу. В [1] этот период жизни описан кратко:

«После окончания первого курса, в августе 1942 года, меня наконец-то призвали в армию и направили в училище младших командиров войск НКВД, по окончании которого я продолжал службу в различных подразделениях войск НКВД» [1, с. 11]⁶.

Здесь нужно обязательно пояснить⁷, что у Федора Митенкова была сильная близорукость, и он всегда носил очки с диоптриями до минус 6

⁶В годы Великой Отечественной войны войска НКВД обеспечивали охрану тыла действующей Красной Армии, вели борьбу с диверсантами, шпионами, бандитизмом; охраняли коммуникации и важные промышленные и иные объекты; несли гарнизонную службу в освобожденных районах; конвоировали военнопленных. Войска НКВД также непосредственно участвовали в боевых действиях в составе Красной Армии; обеспечивали подготовку диверсионно-разведывательных групп, которые, в частности, взаимодействовали с партизанами; осуществляли радиопротиводействие противнику. В завершающем периоде Великой Отечественной войны служебно-оперативная деятельность войск НКВД осуществлялась на значительной территории по фронту и в глубину, характеризовалась большой напряженностью и многочисленностью боевых столкновений. См.: Войска НКВД в годы Великой Отечественной войны (1941–1945). URL: <https://rosguard.gov.ru/ru/page/index/vojska-nkvd-v-gody-velikoj-otechestvennoj-vojny-1941-v-1945-gg> (дата обращения: 07.09.2025).

⁷Уточнение сделано Еленой Федоровной Митенковой, дочерью Ф. М. Митенкова.



(и тогда в очках были тяжелые стекла, а не пластик, как сейчас). Хотя он и пытался попасть в летную школу, как его два товарища, но с таким зрением в действующую армию его просто не могли взять.



Федор Митенков в воинской форме, первая половина 1940-х гг. [2]

Fyodor Mitenkov in military uniform, first half of the 1940s [2]

В июне 1946 г. Федор Митенков был демобилизован. 14 июня он подал заявление о восстановлении его в число студентов университета, поскольку в связи с призывом в РККА он был отчислен из СГУ 21 октября 1942 г. [2]. С 15 июня он был восстановлен на первом курсе физико-математического факультета с назначением стипендии, а следующим приказом от 4 июля переведен на второй курс.

18 июля 1945 г. в Саратовском университете свершилось знаменательное событие: был образован самостоятельный физический факультет, на который были переведены студенты прежнего физико-математического факультета. Родители горячо приветствовали желание сына продолжать учебу в университете, хотя положение семьи было весьма тяжелым (здоровье отца, демобилизованного из армии, оставляло желать лучшего). «Поэтому, – писал Федор Михайлович, – у меня не было уверенности, что ему будет по силам содержать меня и мою младшую сестру еще четыре года <...>. Моей стипендии, хотя и повышенной, явно было недостаточно для самообеспечения [1, с. 11]. И «для страховки» Федор принял нетривиальное для исполнения

решение: до окончания университета получить дополнительно диплом юриста, чтобы устроиться на работу, связанную с юриспруденцией, если жизненные обстоятельства не позволят ему завершить учебу в университете:

«... Я рассчитывал на то, что мне удастся пройти весь курс обучения за более короткий срок. Основанием для таких надежд явилось то, что после ознакомления с учебной программой Юридического института у меня сложилось впечатление, что по ряду дисциплин, входящих в программу, я уже имел некоторый запас знаний, а умение работать с книгой, постоянный интерес к истории, философии и уверенность в своей работоспособности вселяли оптимизм относительно возможностей изучения специальных дисциплин. Производственную практику в прокуратуре я надеялся совместить с летними каникулами в университете» [1, с. 11].

Задуманное сложилось: в 1948 г. Ф. М. Митенков получил диплом Всесоюзного заочного юридического института. Отцу сказал, что теперь может устроиться на работу (он оставил о себе благоприятное впечатление в прокуратуре в период прохождения практики), но, видимо, придется покинуть университет или перейти на заочное обучение, если работа позволит. Но Михаил Сергеевич не отступил от своей цели дать детям высшее образование и после раздумий сказал: «Давай, сын, поднатужимся и кончим университет нормально, как положено».

Тем не менее, напряженные занятия одновременно в двух вузах не прошли бесследно для здоровья Федора: в 1948 г. у него обнаружили серьезное заболевание легких. Помимо медицинских процедур, его выручили оптимизм, увлеченность учебой, занятия спортом, а также «диета» от матери – рыбий жир, черная редька и (иногда) козье молоко.

В студенческой среде Федор Митенков, безусловно, выделялся. В его автобиографических заметках содержится такое признание:

«В университете обучение у меня шло нормально, хотя по ряду курсов я предпочитал самостоятельную работу с книгами и довольно много лекций пропускал. Замечаний по этому поводу мне не делали, поскольку большинство экзаменов я сдавал досрочно, получая высшие баллы» [1, с. 12]⁸.

Сейчас такой самостоятельный метод обучения соотносят с индивидуальным учебным планом студента, индивидуальной «образовательной траекторией».

⁸К примеру, в архиве СГУ хранится приказ по университету от 13 июля 1949 г. № 370, в котором Ф. М. Митенков значится в списке студентов физического факультета, переводимых на 5-й курс с повышенной стипендией.



Студенческие документы Ф. М. Митенкова [2, л. 6, 7]
Fyodor M. Mitenkov's student documents [2, sh. 6, 7]

Дипломную работу Федор Михайлович выполнил у А. Д. Степуховича, в ту пору доцента кафедры теоретической физики, впоследствии – профессора, основателя кафедры химической физики физического факультета СГУ [7]. В группу «подопечных» Александра Давидовича входили также Л. М. Тимонин⁹ и А. Г. Финкель¹⁰ [8]. Спустя полвека Абрам Герцевич Финкель так вспоминал о студенческой поре:

«Весной, на четвертом курсе, мы пришли к Александру Давидовичу, и началась наша работа. Нам с Федей выделили уголок в маленькой комнатке на кафедре и поручили собирать довольно сложную вакуумную установку. <...>

С нами в комнате работали три женщины-химика. С начала они относились к нам не очень доброжелательно: и так мало места, а тут мы со своей огромной установкой. Но потом, во многом благодаря Феде, его способности налаживать отношения, мы все стали жить дружно.

Зимой в комнатке было жутко холодно, так как она была угловой и плохо отапливалась. Мы приходили рано утром, снимали рубашки – и давай заводить мотор, разогревать установку! Работы было много, установку достраивали и переделывали на ходу, бегали за жидким азотом, который был необходим для опытов. Азот нужно было использовать в тот же день, так как он быстро испаряется. Так что мы дневали и ночевали в нашей лаборатории. Часто случалось, что заведем с Федей мотор – вылетают пробки во всем корпусе!

Мы занимались тепловым крекингом, сделали с Федей установку, с помощью которой исследовали кинетику разрушения углеводородов. Это и стало темой наших дипломных работ. Александр Давидович, наш научный руководитель, проявлял к нам большое внимание, много помогал.

Работалось и дружилось очень легко. Пожалуй, за все годы моей работы и на заводе, и в университете, такого больше не было. Это был надежный, сосредоточенный, тихий, очень работоспособный и целеустремленный человек. Теперь мы все видим результаты этой целеустремленности. Это уникаль-

⁹Тимонин Леонид Михайлович (07.03.1928–14.08.2009) – доктор технических наук, профессор, участник разработки и совершенствования ядерных вооружений. Лауреат Сталинской (1954), Ленинской (1962) и Государственной (1982) премий СССР, заслуженный деятель науки РФ (1996). Все годы после окончания СГУ проработал в организациях, входящих ныне в Российский федеральный ядерный центр ВНИИЭФ (г. Саров).

¹⁰Финкель Абрам Герцевич (17.02.1928–13.09.2009) – кандидат физико-математических наук (1966), доцент, доцент кафедры оптики (оптики и биофотоники) физического факультета Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского. Научные направления: инфракрасная спектроскопия, электрооптические характеристики жидких кристаллов.



А. Д. Степухович и его дипломники (слева направо): Л. М. Тимонин, А. Г. Финкель, Ф. М. Митенков. 28 июня 1950 г.
Aleksandr D. Stepuchovich and his graduate students (namely): Leonid M. Timonin, Abram G. Finkel and Fyoder M. Mitenkov.
28 June 1950

но, что Федя занялся атомной и ядерной физикой и почти с нуля достиг таких высот»¹¹



Защита дипломных работ в Большой физической (Горьковской) аудитории. Июнь 1950 г. Ф. Митенков – первый справа во втором ряду (в очках). Фото из газеты «Саратовский университет» от 29 июня 2004 г.

Graduation defense in the Large Physics (Gorky) Auditorium. June 1950. Fyodor Mitenkov – first on the right in the second row (wearing glasses). Photo from the newspaper “Saratov University”, June 29, 2004

По окончании университета Федор Михайлович видел свое призвание в научной деятельности:

«На четвертом курсе меня привлек к научной работе профессор Степухович Александр Давидович, который читал на физическом факультете курс статистической физики, читал талантливо, увлекал слушателей и сам увлекался. Поэтому у него хронически не хватало времени. Он назначал дополнительные часы, и студенты аккуратно их посещали. Его научной специализацией была химическая физика. В своих исследованиях он ориентировался на работы академика Н. Н. Семенова (позднее – лауреата Нобелевской премии)¹².

По результатам теоретических и экспериментальных работ, которые я выполнил под руководством А. Д. Степуховича, мною были подготовлены три статьи, опубликованные в журнале «Физическая химия» в 1951 г., в журнале «Общая химия» в 1953 г. и в сборнике статей по общей химии, изданном АН СССР в 1955 г.»¹³.

По окончании обучения А. Д. Степухович предложил мне поступить к нему в аспирантуру. Я охотно согласился, поскольку к этому времени довольно глубоко погрузился в задачи химической физики. В это время появился русский перевод книги П. Л. Полинга «Квантовая химия», которая добротнее продемонстрировала существенное расширение возможностей решения задач химической физики за счет использования аппарата квантовой механики.

Однако с аспирантурой возникли трудности, как потом оказалось, непреодолимые. Хотя я сдал

¹¹ Академиками не рождаются // Саратовский университет. 2004. 29 июня. № 5 (2025). С. 6.

¹² Тема «Н. Н. Семенов и Саратовский университет» отражена в ряде публикаций (см. [9–11]).

¹³ Журнальные статьи Ф. М. Митенкова, подготовленные в студенческие годы: *Степухович А. Д., Митенков Ф. М.* Кинетика цепного распада этана при давлении выше атмосферного // Журнал физической химии. 1951. Т. 25, № 2. С. 203–211. EDN: XMJFBZ; *Степухович А. Д., Митенков Ф. М.* О каталитической термополимеризации изобутилена на кварце при низких давлениях // Журнал общей химии. 1953. Т. 23, № 2. С. 200–203. EDN: XMJFAD



вступительные экзамены, официальное зачисление застопорилось. Дело было в том, что ко времени окончания нами пятого курса из Москвы приезжала специальная комиссия, которая отобрала часть выпускников-физиков без собеседования с ними, ориентируясь только на анкетные данные. По завершении работы комиссия передала ректору список выпускников, которых он не вправе распределять по заявкам ведомств. В этот список попала и моя фамилия. Как я узнал уже значительно позже, по этому списку выпускники направлялись в распоряжение Первого Главного управления [при Совете министров СССР] (позднее было преобразовано в Министерство среднего машиностроения), в ведении которого находилась атомная промышленность.

Несмотря на это предписание, ректор университета решил уступить настойчивым усилиям профессора А. Д. Степуховича, и я был зачислен в аспирантуру, за что позднее ректор получил то ли замечание, то ли выговор от Министра высшего образования. Мне же пришлось проститься с аспирантурой и начать свою производственную деятельность в соответствии с распределением по линии Первого Главного управления».

Ректором Саратовского университета в годы учебы Ф. М. Митенкова был доктор физико-математических наук, профессор-физик Петр Васильевич Голубков, избранный 9 февраля 1947 г. в Верховный Совет РСФСР второго созыва

по Ленинскому избирательному округу г. Саратова [12]. Ему, вероятно, тоже не хотелось терять талантливого студента, и «корректируя» решение московской комиссии, он, возможно, «опирался» на свой государственный статус. В личном деле П. В. Голубкова министерского выговора нет, но есть копия лаконичного приказа от 7 декабря 1950 г. за подписью Министра высшего образования СССР С. В. Кафтanova о его освобождении от обязанностей ректора Саратовского государственного университета им. Н. Г. Чернышевского¹⁴.

Важная жизненная деталь: на пятом курсе, в январе 1950 г., Ф. М. Митенков женился на своей однокурснице Людмиле Ивановне Турабовой. Окончив 3-ю женскую школу Саратова с золотой медалью, Людмила Турабова стала студенткой университета в 1945 г., и ее написанное каллиграфическим почерком заявление о поступлении на физический факультет СГУ от 2 августа 1945 г. с визой от 4 августа – «Зачислить на 1-й курс без экзаменов» – сохранились в архиве СГУ. Там же и краткая автобиография: родилась в Саратове 5 марта 1927 г., отец – рабочий, член ВКП (б), мать – служащая. Домашний адрес –



Страницы студенческого билета Л. И. Турабовой [2]
Pages from Ludmila I. Turabova's student ID card [2]

¹⁴Архив Саратовского университета. Личное дело Петра Васильевича Голубкова. Л. 65.



ул. Вольская, 7, кв. 5. По окончании университета она была направлена в аспирантуру.

Ненадолго прервем хронологию изложения. Жизненные траектории Федора Михайловича и Людмилы Ивановны слились на все последующие годы. В Горьком Людмила Ивановна стала преподавать в университете. В одном из интервью она рассказывала:

«Мы учились в одной группе в вузе – я тоже физик (правда, специализировались на разных кафедрах). Скажу честно, Федор Михайлович на голову был выше самых успешных студентов. Я сама закончила с золотой медалью школу, но когда познакомилась с ним, поняла: я – способный человек, а он – талантливый. Поэтому я с самого начала решила, что буду делать все, чтобы он во всей полноте смог раскрыть свои таланты. Помню, когда он уже становился заметным ученым, мы были приглашены на какой-то вечер в Москве, и там ко мне подошел академик Анатолий Петрович Александров. Он отвел меня в сторону и сказал: «Вы знаете, что ваш муж сейчас выходит на уровень международной науки. Готовы ли вы помочь ему?» Я кивнула. Я прекрасно понимала, о какой помощи идет речь. Я и так всю жизнь старалась обеспечить ему надежный тыл. <...>

В молодости, да и в зрелые годы он работал с утра до вечера. Правда, отпуск мы всегда проводили вместе со своей семьей. Купили лодку и каждый год плавали на ней по Волге. Домик купили в деревне, который даже трудно назвать дачей, и там жили. В отпуск он старался не работать, в том понимании, что ничего не чертил, не считал. Но работа мысли была всегда. Я налью ему чай, а он смотрит на чайники, и пытается сразу найти объяснение, почему они плавают в чашке именно по этой траектории»¹⁵.

В свою очередь Федор Михайлович признавался: «Если бы не жена, вряд ли мне вообще удалось бы добиться в науке таких высот. Она ни разу ни в чем меня не упрекнула и всегда очень помогала»¹⁶.

«А этот представитель далеко пойдет...»

7 ноября 1950 г. Ф. М. Митенков прибыл в Горький для работы в Особом конструкторском бюро (ОКБ) Горьковского машиностроительного завода. Волновался – ему казалось, что он не готов к работе на промышленном предприятии,



Людмила Ивановна и Федор Михайлович Митенковы, январь 1950 г. [1]

Ludmila I. and Fyodor M. Mitenkovs, January 1950 [1]

¹⁵ Академик Федор Митенков: «В атомной сфере главное – безопасность». URL: <https://nn.mk.ru/article/2013/09/24/920086-akademik-fedor-mitenkov-v-atomnoy-sfere-glavnoe-bezopasnost.html> (дата обращения: 09.11.2025).

¹⁶ Белашева И. П. Книга о людях, изменивших мир. М. : Эдитус, 2019. С. 39.



поскольку университетские дисциплины (за исключением разве что начертательной геометрии) не были ориентированы на заводскую деятельность. В Саратовском университете он приобрел опыт теоретических и экспериментальных исследований по физике, и зачисление в аспирантуру открывало путь к научной деятельности. При первой беседе с Главным конструктором ОКБ, будущим академиком РАН А. И. Савиным, Митенков признался, что предпочитает заниматься задачами, требующими, прежде всего, знания математики. Его желание учли, и он был направлен в подразделение, занимавшееся разработкой проектов диффузионных машин, использовавшихся на специальных заводах по обогащению урана.

Первые месяцы пребывания в производственной обстановке для Федора Митенкова были трудными в психологическом плане, все вокруг казалось непривычным, не оставляло желание вернуться к университетской жизни. Но со временем он убедился, что работа в ОКБ требует не только технических, но широких физико-математических знаний, инициирует творческую активность не в меньшей степени, чем занятия в университетской лаборатории. Кроме того, работа конструктора, в отличие от «чистой науки», всегда имеет не отложенное, а немедленное целенаправленное применение при разработке новой техники. И выяснилось, что на самом деле полученная на физическом факультете подготовка является надежной теоретической базой для овладения техническими дисциплинами. Федор Митенков разработал для себя «алгоритм» получения дополнительного технического образования, который, по существу, являлся продолжением его стиля учебы в университете:

«Войдя в рабочий контакт с конструкторами, я довольно скоро понял, что для активного и инициативного сотрудничества с ними мне крайне необходимо пополнить свои знания в таких научных дисциплинах как материаловедение, сопротивление материалов, техническая механика, теория управления. Я составил для себя рабочий план, набрал в заводской библиотеке подходящую литературу. Кстати, заводская библиотека по тем временам имела достаточно хороший набор технической литературы. Я обязал себя ежедневно усваивать определенные разделы и вскоре убедился, что университетская программа физического факультета позволяет мне продвигаться в освоении технических дисциплин без особых затруднений» [1, с. 16].

Первой самостоятельной работой в ОКБ для Ф. Митенкова стало теоретическое обоснова-

ние конструкции сверхзвукового центробежного компрессора так называемого половинного расхода, обеспечивающего существенное снижение энергозатратности процессов в диффузионной машине, которая конструктивно представляла собой многоступенчатую систему компрессоров. Варианты компрессоров проходили неоднократные испытания.



Ф. М. Митенков, начало 1950-х гг.¹⁷

Fyodor M. Mitenkov, early 1950s

Аналитическое решение проблемы требовало знания особенностей сверхзвукового течения газа, термодинамики, механики сплошных сред, а также физической интуиции. Проводились многочисленные эксперименты по подбору геометрии вращающихся лопаток компрессора. Наконец, удачный вариант проточной части компрессора был установлен, и во всех последующих разработках проектов диффузионных машин их проточные части сохраняли подобие с оптимальной конструкцией.

Своеобразие момента состояло в том, что в ОКБ одновременно с центробежным компрессором (с наличием составляющей скорости движения атомов газа от оси), разрабатывалась и конструкция сверхзвукового осевого компрессора с преимущественным течением газа вдоль оси (эта работа велась под руководством профессора М. Д. Миллионщикова, будущего академика). Приоритет же на заключительной стадии работ был отдан именно проекту Ф. М. Митенкова,

¹⁷Семейный архив Е. Ф. Митенковой.



которому М. Д. Миллионщиков сделал «комплимент», предложив ему подготовить кандидатскую диссертацию по материалам имевшихся работ. Диссертация «Разработка оборудования для обогащения урана диффузионным методом» была успешно защищена Ф. М. Митенковым в Научно-исследовательском и конструкторском институте энерготехники (г. Москва) в начале 1959 г. и «открыла дорогу» диссертационным защитам в ОКБ, где до этого подобная форма представления научных работ считалась чуть ли не дурным тоном. Кстати, опыт, приобретенный при разработке диффузионного компрессора, помог Ф. М. Митенкову в 1953 г. в разработке проекта главного циркуляционного герметичного насоса для первого в мире атомохода «Ленин».

Таким образом, уже в первые годы самостоятельной работы Федор Михайлович Митенков зарекомендовал себя авторитетным инженером-конструктором и ученым. Ему доверяли представлять ОКБ (а потом и ОКБМ) на различных отчетных и консультационных мероприятиях, переговорах с заказчиками. Он ездил, например, «делиться опытом» к «отстающим», в Конструкторское бюро Кировского завода в Ленинграде, где параллельно разрабатывали свою версию диффузионной машины.

Сильное впечатление он произвел в 1965 г. на совещании в Центральном конструкторском бюро (ЦКБ) «Айсберг» (Ленинград), занимавшегося проектированием атомохода «Арктика». Отчет ОКБМ в рамках НИОКР по договору с ЦКБ содержал *теоретическое* обоснование конструкции атомной паропроизводящей установки с частичным кипением в активной зоне для данного атомохода. Уже сам набор этих терминов вызвал у заказчиков желание понять, что же за этим скрывается *практического*, и все заинтересованно ждали выступление скромно державшегося представителя ОКБМ. Когда Федор Михайлович заговорил и «перевел» физику «частичного кипения в активной зоне» на привычные для производственников понятия мощность, температура, давление, размеры, скорость, надежность и т. д., все сомнения и вопросы у присутствующих были сняты. И кто-то при итоговом неформальном обсуждении сказал: «А этот представитель далеко пойдет...» [1, с. 255].

В то время Федор Михайлович был уже начальником физического расчетного отдела ОКБМ и заведовал специальной кафедрой № 2 на физико-техническом факультете Горьковского политехнического института. Его талант объяснять сложную физику и математику студенческой аудитории отмечали неоднократно. В 1967 г. в диссертационном совете при Физико-энергетическом институте (г. Обнинск) он защитил докторскую диссертацию «Проектирование судовых ядерных энергетических установок»¹⁸.

Правила жизни академика Ф. М. Митенкова

Формально саратовская часть жизни Федора Михайловича и Людмилы Ивановны Митенковых ограничена 1950 годом, когда Федор Михайлович был направлен на работу в г. Горький. Но их связи с Саратовом и университетом не прерывались, они, в частности, приезжали на юбилейные встречи выпускников физического факультета. На фото 1970 г. в Большой физической аудитории они запечатлены с однокурсниками – Л. М. Тимониным, доцентом кафедры оптики Н. К. Сидоровым и доцентом кафедры электронной техники В. Н. Артемьевым.

Уровень полученных Ф. М. Митенковым государственных наград и почетных званий красноречиво и, главное, достоверно свидетельствует о его выдающихся достижениях и заслугах в области обеспечения энергетической и военной безопасности государства: он удостоен звания Героя Социалистического Труда, награжден рядом высших орденов СССР и РФ, являлся лауреатом Государственных премий СССР и РФ, включая Ленинскую премию, заслуженным деятелем науки РФ. В 1979 г. Ф. М. Митенков был избран член-корреспондентом АН СССР по Отделению механики и процессов управления, а в 1990 году – действительным членом (академиком) АН СССР (РАН) по Отделению проблем машиностроения, механики и процессов управления. Международное признание выразилось, в частности, в избрании его Почетным членом Европейского Ядерного общества (ENS Honoris Member) и присуждении Международной энергетической премии «Глобальная энергия» с формулировкой: «За разработку физико-технических основ и создание энергетических реакторов на быстрых нейтронах».

¹⁸Как отмечается на сайте Российской академии наук, под руководством Ф. М. Митенкова защищены 55 кандидатских диссертаций. Подготовка 14 докторских диссертаций проходила при его научном консультировании. См.: Академик Митенков Федор Михайлович. URL: <https://www.ras.ru/news/shownews.aspx?id=cb1dbe32-ddc3-4224-8eea-db29313490ba> (дата обращения: 10.11.2025).



1970 г. На встрече выпускников физического факультета (слева направо): Н. К. Сидоров, Л. М. Тимонин, Ф. М. Митенков, В. Н. Артемьев, Л. И. Митенкова [1]

1970 At the meeting of graduates from the Physics Department (from left to right): Nikolay K. Sidorov, Leonid M. Timonin, Fyodor M. Mitenkov, Vladislav N. Artem'yev, Ludmila I. Mitenkova [1]

Вся трудовая биография, научные работы и публицистические выступления Федора Михайловича отражают его целенаправленную деятельность по неустанным развитию атомной энергетики в аспекте ее технического совершенства и предельной безопасности.

Чернобыльская катастрофа непосредственно затронула семью Митенковых: сын Андрей, только что закончивший институт по специальности «Ядерные реакторы и энергетические установки», с июля 1986 по март 1987 г. руководил работой Отдельной группы радиационной разведки в самых горячих точках АЭС и зоны отчуждения¹⁹.

Главным критерием надежности атомного объекта Федор Михайлович считал недопущение утечки радиации при любых обстоятельствах эксплуатации и внешних воздействий (будь то человеческий фактор, техногенная катастрофа, иное воздействие). Собственно, это и демонстрировали созданные им энергетические установки.

Сфера научной и экспертной деятельности Ф. М. Митенкова широко выходила за рамки работы ОКБМ. Ф. М. Митенков являлся одним из разработчиков «Стратегии развития атомной энергетики России в первой половине XXI века». Он принимал активное участие в анализе технических проблем и перспектив развития атомной энергетики, твердо высказывая при этом свое подкрепленное обоснованиями мнение, которое становилось нередко решающим. Как главный научный сотрудник, член Ученого совета Нижегородского филиала Института машиноведения им. А. А. Благонравова РАН²⁰, академик Ф. М. Митенков участвовал в определении его стратегии развития и основных научных направлений²¹. Он возглавлял диссертационный совет в Горьковском политехническом институте (сейчас Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева).

Федор Михайлович выработал для себя ряд принципиальных положений, которым следовал всю свою жизнь: безвыходных ситуаций не бы-

¹⁹См. Митенков А. Ф. Четверть века: воспоминания о группе радиационной разведки. Н. Новгород : Издательство Нижегородского государственного технического университета, 2012. 144 с.

²⁰Ныне Институт проблем машиностроения РАН – филиал ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А. В. Гапонова-Грехова РАН».

²¹См.: Митенков Ф. М. URL: <http://ipmran.ru/institute/personalities.php?id=2> (дата обращения: 21.11.2025).



Л. И. Митенкова на открытии бюста академика Ф. М. Митенкова, 5 марта 2019 г.²²
Ludmila I. Mitenkova at the unveiling of the bust of Academician F. M. Mitenkov, March 5, 2019

вает; если есть задача, то есть и ее решение (нет нерешаемых задач, есть нерешенные); дорогу осиливает только идущий. Как отмечала дочь академика Елена Федоровна Митенкова на мероприятиях, посвященных увековечению памяти ее отца, определяющими чертами его личности были постоянная готовность к решению новых задач, какой бы сложности они ни были, и умение спланировать вокруг себя команду единомышленников. Она приводит жизненный девиз Федора Михайловича, выраженный в его стихах²³:

*«Жить без мечты – себя ограбить!
Жить без мечты – всего лишь тлеть!
А счастье ведь тогда бывает,
Когда приходится гореть!»*

Забываясь о будущих кадрах для атомной отрасли, И. И. Африкантов и Ф. М. Митенков добились в 1961 г. открытия в Горьковском политехническом институте физико-технического факультета, ставшего со временем ключевым подразделением вуза. В 2009 г. на базе этого факультета был образован Институт ядерной энергетики и технической физики (ИЯФиТФ), первым научным руководителем которого стал

академик Ф. М. Митенков. Ныне Образовательно-научный институт ядерной энергетики и технической физики носит его имя. 4 марта 2019 г. в институтском корпусе установлен бюст Ф. М. Митенкова, а спустя день на фасаде главного корпуса Нижегородского технического университета им. Р. Е. Алексеева появилась посвященная ему мемориальная доска. 19 ноября 2024 г. в ИЯФиТФ открыта мемориальная аудитория Ф. М. Митенкова. Памятная доска отмечает и дом, в котором проживал в 1968–2016 гг. почетный гражданин Нижнего Новгорода Фёдор Михайлович Митенков.

Начиная с 2021 г. в Нижегородском техническом университете проходит вручение премии имени академика Ф. М. Митенкова в области науки и инноваций для молодых ученых атомной отрасли. Средства для этой премии дает созданный по инициативе и при участии Людмилы Ивановны Митенковой целевой капитал Ф. М. Митенкова, входящий общий эндаумент-фонд университета. В составе экспертного совета фонда – Елена Федоровна Митенкова, заведующая лабораторией нейтронно-физических рас-

²³Федор Михайлович Митенков со школьных лет был широко образован, обладал литературным даром.



четов Института проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, г. Москва.

Случайное, но интересное совпадение: неподалеку от школы, в которой учился Федор Митенков, 11 октября 2023 г. открылся Региональный центр выявления, поддержки и развития способностей и талантов детей и молодежи на территории Саратовской области «Галактика64».

Список литературы

1. Митенков Ф. М. Размышления о пережитом. М. : ИздАТ, 2004. 400 с.
2. Архив Саратовского университета. Личное дело Митенкова Федора Михайловича. 7 л.
3. Хромова Г. В. История одной фотографии 1941 года // Очерки истории физико-математического образования в Саратовском университете / под общей ред. В. М. Аникина. Саратов : Издательство Саратовского университета, 2019. С. 51–54.
4. Аникин В. М., Гнеденко Д. Б., Федорова М. А. Саратовские годы братьев Бориса и Глеба Гнеденко // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2023. Т. 23, вып. 1. С. 68–98. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-1-68-98>, EDN: WIJAUS
5. Шашкина М. Н., Аникин В. М. Саратовские годы Олега Антонова: конструктор планеров и студент университета // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2025. Т. 25, вып. 1. С. 113–128. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-1-113-128>, EDN: XOMS
6. Аврус А. И., Гапоненков А. А., Данилов В. Н. История Саратовского университета. 1909–2009 : в 2 т. Саратов : Издательство Саратовского университета, 2009. Т. 1. С. 188–194. EDN: QXWPOJ
7. Гольдфейн М. Д., Карнаухова Л. И., Кожевников Н. В. Профессор Александр Давидович Степухович – организатор научной школы в области химической физики в Саратов (К 100-летию со дня рождения) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2011. Т. 11, вып. 2. С. 75–90. EDN: OOVGDL
8. Майзенберг Е. А., Медведев Б. А., Симоненко Г. В., Синичкин Ю. П., Старшов М. А., Тучин В. В., Цой В. И., Яковлев Д. А. Слово об Абраме Герцевиче Финкеле // Очерки истории физико-математического образования в Саратовском университете. Саратов : Издательство Саратовского университета, 2022. Вып. 4. С. 157–175.
9. Аникин В. М., Усанов Д. А. Николай Николаевич Семёнов: волжские сюжеты жизни // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2016. Т. 16, № 2. С. 109–121. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-2-109-121>, EDN: WJLLJR
10. Аникин В. М. Физик-инноватор, земляк, учитель и друг Н. Н. Семёнова Владимир Иванович Кармилов // Известия Саратовского университета. Новая

серия. Серия : Физика. 2016. Т. 16. № 1. С. 44–54. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-1-44-54>, EDN: VSKUUZ

11. Аникин В. М. Первая Нобелевская (К 60-летию присуждения Нобелевской премии академику Н. Н. Семёнову) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2017. Т. 17. № 3. С. 201–211. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2017-17-3-201-211>, EDN: ZTHZFX
12. Дмитриев Б. С. Пётр Васильевич Голубков: Страницы биографии в контексте истории физического факультета и университета // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2014. Т. 14, вып. 1. С. 69–75. EDN: TDVEKR

References

1. Mitenkov F. M. *Razmyshleniya o perezhitom* [Reflections on the experience]. Moscow, IzdAT, 2004. 400 p. (in Russian).
2. *Archive of Saratov State University. Personal file of Fyodor M. Mitenkov*. 7 sh. (in Russian).
3. Khromova G. V. The story of one photograph from 1941. *Ocherki istorii fiziko-matematicheskogo obrazovaniya v Saratovskom Universitete* [Anikin V. M., ed. Essays on the History of Physics and Mathematics education at the Saratov University]. Saratov, Saratov State University Publ., 2019, pp. 51–54 (in Russian).
4. Anikin V. M., Gnedenko D. B., Fedorova M. A. Saratov life of brothers Boris and Gleb Gnedenko. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 1, pp. 68–98 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-1-68-98>
5. Shashkina M. N., Anikin V. M. Oleg Antonov's Saratov years: Glider designer and university student. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 1, pp. 113–128 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-1-113-128>, EDN: XOMSFS
6. Avrus A. I., Gaponenkov A. A., Danilov V. N. *History of Saratov University. 1909–2009* : in 2 vols. Saratov, Saratov State University Publ., 2009, vol. 1, pp. 188–194 (in Russian). EDN: WIJAUS
7. Goldfein M. D., Karnaukhova L. I., Kozhevnikov N. V. Professor Alexander Davidovich Stepukhovich – organizer of the scientific school in the field of Chemical Physics in Saratov (On the 100th Anniversary of his birth). *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2011, vol. 11, iss. 2, pp. 75–90 (in Russian). EDN: OOVGDL
8. Maisenberg E. A., Medvedev B. A., Simonenko G. V., Sinichkin Yu. P., Starshov M. A., Tuchin V. V., Tsoi V. I., Yakovlev D. A. A Word about Abram Gertsevich Finkel. *Ocherki istorii fiziko-matematicheskogo obrazovaniya v Saratovskom Universitete* [Anikin V. M., ed. Essays on the History of Physics and Mathematics education at the Saratov University]. Saratov, Saratov State University Publ., 2022, iss. 4, pp. 157–175 (in Russian).
9. Anikin V. M., Usanov D. A. Nikolai Nikolaevich Semenov: Volga life stories. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2016, vol. 16, iss. 2, pp. 109–121



- (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-2-109-121>, EDN: WJLLJR
10. Anikin V. M. Innovative physicist, fellow countryman, teacher and friend of N. N. Semenov Vladimir Ivanovich Karmilov. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2016, vol. 16, iss. 1, pp. 44–54 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-1-44-54>, EDN: VSKUUZ
11. Anikin V. M. The First Nobel Prize (On the 60th Anniversary of the Awarding of the Nobel Prize to Academician N. N. Semenov). *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2017, vol. 17, iss. 3, pp. 201–211 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2017-17-3-201-211>, EDN: ZTHZFX
12. Dmitriev B. S. Petr Vasilyevich Golubkov: Pages of a biography in the context of the history of the Physics Department and the University. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2014, vol. 14, iss. 1, pp. 69–75 (in Russian). EDN: TDVEKR

Поступила в редакцию 23.11.2025; одобрена после рецензирования 15.12.2025;
принята к публикации 19.12.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 23.11.2025; approved after reviewing 15.12.2025;
accepted for publication 19.12.2025; published 31.03.2026

PERSONALIA

Профессору Василию Фёдоровичу Названову – 90 лет

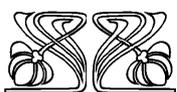
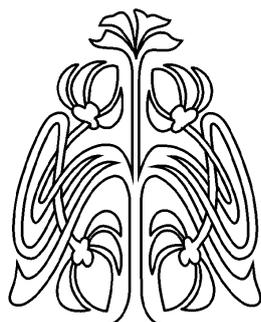


15 марта 2026 г. исполнилось 90 лет Василию Федоровичу Названову, известному ученому, почетному работнику Высшего профессионального образования Российской Федерации, профессору, доктору физико-математических наук, старейшему сотруднику кафедры физики твердого тела Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского.

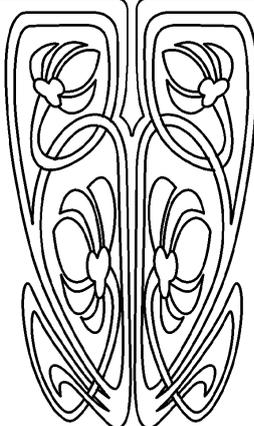
Василий Федорович Названов родился 15 марта 1936 г. в крестьянской семье (с. Ичалки Ичалковского района Мордовской АССР). После семилетнего обучения в общеобразовательной школе продолжил образование в Ичалковском педагогическом училище Министерства просвещения РСФСР, которое окончил с отличием в 1954 г. Затем поступил в Мордовский государственный педагогический институт, который был вскоре преобразован в Мордовский государственный университет (г. Саранск).

В 1959 г., по окончании университета с отличием, Василий Федорович поступил в целевую аспирантуру при Саратовском государственном университете имени Н. Г. Чернышевского по специальности «физика полупроводников и диэлектриков» (кафедра физики твердого тела). После аспирантуры работал в должности ассистента, а затем старшего преподавателя Мордовского госуниверситета.

В 1965 г., переехав в г. Саратов, В. Ф. Названов поступил на работу в НИИ механики и физики при Саратовском госуниверситете, занимая должности инженера, старшего инженера, заведующего лабораторией полупроводников. В 1968 г., в диссертационном Совете при СГУ, он защитил диссертацию на соискание



ПРИЛОЖЕНИЕ





ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «Физика полупроводников и диэлектриков». В диссертации изучались фотоэлектрические свойства поликристаллических пленок сульфида кадмия, полученных вакуумным испарением и активированных хлоридами металлов. Основным результатом работы стал вывод о концентрационном механизме фотопроводимости исследованных пленок.

С октября 1970 г. по июнь 1971 г. Василий Федорович проходил научную стажировку в Карловом университете (г. Прага, Чехословакия). Ее содержание составило изучение оптических свойств полупроводников (на примере монокристаллов Se).

В январе 1970 г. В. Ф. Названов был избран по конкурсу на должность старшего преподавателя, а в октябре 1971 г. – на должность доцента кафедры физики твердого тела СГУ. В 1973 г. он был утвержден в ученое звание доцента по данной кафедре.

В сентябре 1990 г. в диссертационном Совете при Московском инженерно-физическом институте В. Ф. Названов защитил докторскую диссертацию по теме «Фотоэлектрическая память в пленках и монокристаллах сульфида кадмия, активированных хлоридами щелочных металлов» по специальности «Физика твердого тела». В мае 1991 г. решением ВАК ему была присуждена ученая степень доктора физико-математических наук. В июле 1991 г. он был избран на должность профессора кафедры физики твердого тела Саратовского госуниверситета, а в июле 1993 г. ему было присвоено ученое звание профессора по этой кафедре.

В руководимой В. Ф. Названовым научной группе впервые был обнаружен и исследован эффект высокотемпературной фотоэлектрической памяти (остаточной проводимости) в пленках и кристаллах сульфида кадмия, легированных хлоридами щелочных металлов, в режимах как поперечной, так и продольной фотопроводимости (при комнатной температуре), впервые разработаны и исследованы управляемые светом транспаранты (модуляторы света) с запоминанием оптических изображений на основе структур фотопроводник – жидкий кристалл, динамические и запоминающие оптически управляемые транспаранты на основе структур CdS/CdTe-ЖК, ZnSe-ЖК с различными электрооптическими эффектами в жидких кристаллах, реализованы электрически и оптически управляемые амплитудно-фазовые модуляторы на поверхностных электромагнитных волнах (плазмонах).

В. Ф. Названов принимал активное участие в выполнении важнейших государственных научно-исследовательских работ, среди которых можно выделить тему по разработке технологии изготовления аморфных пленок кремния для создания солнечных элементов на их основе.

По результатам научных исследований им опубликовано свыше 230 работ, получено 9 авторских свидетельств на изобретения. Он награжден знаком «Изобретатель СССР». Под научным руководством Василия Федоровича выполнено и защищено 6 кандидатских диссертаций.

В течение ряда лет принимал участие в работе трех диссертационных Советов при Саратовском госуниверситете, являлся членом экспертной комиссии физического факультета и НИИ механики и физики СГУ.

В. Ф. Названов гармонично сочетает научную деятельность с педагогической. Является автором программ курсов «Кристаллофизика и методы исследования структур» и «Оптоэлектроника», разработанных по специальности «Физика полупроводников и диэлектриков» для университетов в 1979 г. под руководством первой заведующей кафедрой физики твердого тела З. И. Кирьяшкиной.

В. Ф. Названов разработал и читал ряд лекционных курсов: «Кристаллография и кристаллофизика», «Квантовая и оптическая электроника», «Основы сенсорики», «Оптика наноструктур». Продолжает читать курсы для магистрантов: «Физика неупорядоченных полупроводников», «Физика фотонных кристаллов», «Бионаносенсорика», «Нанопотоника». По ряду вышеназванных учебных дисциплин им написаны и изданы учебные пособия.

Активная общественная жизнь Василия Федоровича в течение 60 лет связана с коллективами кафедры физики твердого тела, физического факультета, НИИ механики и физики СГУ, факультета нано- и биомедицинских технологий, Института физики СГУ. В этот период он ряд лет исполнял обязанности председателя профсоюзного бюро физического факультета и НИИ механики и физики СГУ, члена партбюро (до 1991 г.), заместителя секретаря партбюро по идеологической работе физического факультета и НИИ механики и физики, парторга кафедры физики твердого тела.



В 2006 г. за заслуги в области образования В. Ф. Названов награжден нагрудным знаком «Почетный работник высшего профессионального образования Российской Федерации». Имеет государственные награды – медали «За освоение целинных земель» (1956) и «Ветеран труда» (1989).

Поздравляем Василия Фёдоровича со знаменательной датой, желаем здоровья и творческих успехов!

*Коллектив кафедры физики твердого тела СГУ.
Редакционная коллегия журнала
«Известия Саратовского университета.
Новая серия. Серия: Физика»*

Статьи В. Ф. Названова в научных журналах

Названов В. Ф. Поверхностные электромагнитные волны оптического диапазона (плазмоны-поляритоны): свойства, применение // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2015. Т. 15, вып. 1. С. 5–14. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2015-15-1-5-14>

Садовой А. В., Шиповская А. Б., Названов В. Ф. Самоорганизация и электрооптические характеристики композита нематический жидкий кристалл-диацетат целлюлозы // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34, вып. 23. С. 15–20.

Садовой А. В., Медведев М. В., Названов В. Ф. Исследование многократного рассеяния света в капсулированных полимером жидких кристаллах: моделирование методом Монте-Карло // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика. 2008. Т. 8, вып. 1. С. 26–29. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2008-8-1-26-29>

Названов В. Ф., Сусяков Ю. В. Об одной особенности спектральной характеристики гетероструктуры ZnS – GaP // Известия высших учебных заведений. Электроника. 2006. № 3. С. 85–86.

Садовой А. В., Названов В. Ф. Оптическое пропускание диспергированными в полимере жидкими кристаллами с углеродными нанотрубками // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 15. С. 30–34.

Афонин О. А., Названов В. Ф. Пропускание света дисперсными системами нематик/полимер NCAP-типа // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26, № 11. С. 1–9.

Афонин О. А., Названов В. Ф. Влияние конечной азимутальной энергии поверхностного сцепления на переход Фредерикса в каплях нематика с биполярной структурой // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24, вып. 11. С. 87–94.

Названов В. Ф., Коваленко Д. И. О разрешающей способности оптически адресуемых жидкокристаллических пространственных модуляторов света // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24, вып. 13. С. 48–53.

Названов В. Ф., Коваленко Д. И. фазовая оптическая бистабильность в структурах с поверхностными плазмонами // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24, вып. 16. С. 60–65.

Названов В. Ф., Коваленко Д. И. Поведение интенсивности и фазы отраженного излучения в структуре на основе двуокиси ванадия с поверхностными плазмонами // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23, вып. 13. С. 32–36.

Названов В. Ф., Коваленко Д. И. Температурная зависимость интенсивности и фазы отраженного света в жидкокристаллической структуре с поверхностными плазмонами // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23, вып. 17. С. 11–15.

Aphonin O. A., Nazvanov V. F. Light transmission, linear dichroism and birefringence of nematic/polymer dispersions // Liquid Crystals. 1997. Vol. 23,iss. 6. P. 845–859.

Aphonin O. A., Nazvanov V. F. Anomalous electro-optical response of NCAP-type nematic/polymer dispersions // Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A: Molecular Crystals and Liquid Crystals. 1997. Vol. 303. P. 29–36.

Названов В. Ф., Коваленко Д. И. О поведении амплитуды и фазы отраженного излучения в многослойных структурах с поверхностными плазмонами // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21, вып. 14. С. 60–63.

Nazvanov V. F., Aphonin O. A., Grebennikov A. I. Characteristics of surface-plasmon liquid-crystal light modulators operating under phase modulation conditions // Quantum Electronics. 1995. Vol. 25, no. 10. P. 1028–1029.

Названов В. Ф., Афонин О. А. Фазовая модуляция оптического излучения в структурах с поверхностными плазмонами // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20, вып. 7. С. 26–31.



Nazvanov V. F., Afonin O. A. Phase modulator of radiation // *Pribory i Tekhnika Eksperimenta*. 1994. Vol. 37, no. 2. P. 206–207.

Афонин О. А., Названов В. Ф. О характеристике пропускания капсулированных нематических жидких кристаллов // *ЖТФ*. 1990. Т. 60, вып. 10. С. 93–99.

Учебные пособия В. Ф. Названова

Полупроводниковые лазеры : учебное пособие. Саратов : Изд-во Саратовского университета, 1971. 87 с.

Физические основы оптоэлектроники : методическое пособие. Саратов : Изд-во Саратовского университета, 1974. 71 с.

Основы оптоэлектроники : учебное пособие. Саратов : Изд-во Саратовского университета, 1980. 230 с.

Введение в кристаллофизику (рекомендовано Комитетом по высшей школе Миннауки в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений). Саратов : Изд-во Саратовского университета, 1993. 41 с.

Введение в кристаллофизику : учебное пособие. 2-е изд., доп. Саратов : Изд-во «Новый ветер», 2016. 120 с.

Физика неупорядоченных полупроводников : учебное пособие. Саратов : Изд-во Саратовского университета, 2004. 56 с.

Физика неупорядоченных полупроводников : учебное пособие. 2-е изд. Лос-Анджелес : Типография Альтруист Капитал при содействии Лулу Пабблишинг, 2010. 71 с.

Laboratory Studies in Quantum and Optical Electronics. Student Manual. Geneva : Published by Lulu.com, 2009. 118 p.

Computer Simulation in Quantum and Optical Electronics. Student Manual. Geneva : Published by Lulu.com, 2009. 161 p.

Лабораторные работы по квантовой и оптической электронике : учебное пособие. Лос-Анджелес : Типография Альтруист Капитал при содействии Лулу Пабблишинг, 2010. 92 с.

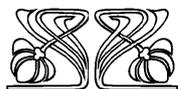
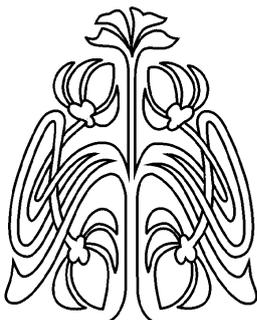
Специальный лабораторный практикум: компьютерное моделирование в лабораторном практикуме по квантовой и оптической электронике. Лос-Анджелес : Типография Альтруист Капитал при содействии Лулу Пабблишинг, 2010. 128 с.

Одномерные фотонные кристаллы в примерах : учебное пособие для вузов. Лос-Анджелес : Типография Альтруист Капитал при содействии Лулу Пабблишинг, 2010. 55 с.

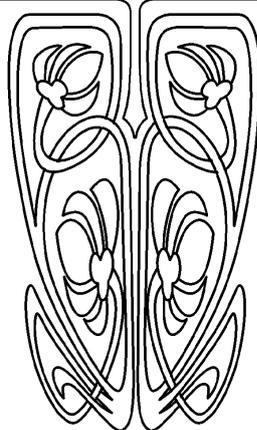
Одномерные фотонные кристаллы в задачах : учебное пособие для вузов. Лос-Анджелес : Типография Альтруист Капитал при содействии Лулу Пабблишинг, 2010. 60 с.

Фотонные кристаллы в примерах и задачах. Саратов : Изд-во «Новый ветер», 2015. 144 с.

Наноплазмоника в наносенсорике и нанофотонике : учебное пособие. Саратов : Изд-во «Новый ветер», 2015. 88 с.



ПОДПИСКА



Подписка на печатную версию

Подписной индекс издания 36015.
Оформить подписку на печатную версию
можно в Интернет-каталоге
ГК «Урал-Пресс» (ural-press.ru).
Журнал выходит 4 раза в год.
Цена свободная

Электронная версия журнала находится
в открытом доступе (fizika.sgu.ru)

Адрес Издательства

Саратовского университета (редакции):

410012, Саратов, Астраханская, 83

Тел.: +7(845-2) 51-29-94, 51-45-49, 52-26-89

Факс: +7(845-2) 27-85-29

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

Адрес редколлегии серии:

410012, Саратов, 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>



ISSN 1817-3020 (Print). ISSN 2542-193X (Online)
Известия Саратовского университета. Новая серия.
Серия: Физика. 2026. Том 26, выпуск 1

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

