

СЕКЦИЯ 6

«СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ»

СОДЕРЖАНИЕ

РЕГИСТРАЦИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ СИГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЯ С МОЛЕКУЛАМИ КРАСИТЕЛЯ Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, с.н.с., Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук	4
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОДХОДОВ К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАСТЕКАНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ВЫБРОСОВ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ПЛАВУЧЕСТИ Галиаскарова Г.Р., канд. физ.-мат. наук, доцент	8
ИЗУЧЕНИЕ МИКРОБНЫХ БИОПЛЕНОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ Гиндер М.В.	12
МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕДИЦИНЫ В ФИЗИКЕ, ХИМИИ И БИОЛОГИИ Гиндер М.В.	15
УСПЕШНЫЙ ОПЫТ И ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОЙ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ И МЕДИЦИНСКИХ ВУЗОВ Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доц.; Бакаев А.А., Говорова В.Д., Шаманская Е.В.	18
КРОСС-АННИГИЛЯЦИЯ МОЛЕКУЛ СИГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА С ТРИПЛЕТНЫМИ ЦЕНТРАМИ ПОЛИАМФОЛИТНОЙ ЦЕПИ НА ЗАРЯЖЕННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЕ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент.....	23
ОСОБЕННОСТИ АННИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ МОЛЕКУЛ И ЭКСИТОНОВ В НАНОСИСТЕМАХ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Пеньков С.А., канд. физ.-мат. наук.....	30
СВЕТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ОПТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА БИОХРОМ НА ОСНОВЕ БАКТЕРИОРОДОПСИНА Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, с.н.с., Раздобреев Д.А., канд. хим. наук, Графкина А.Е., Чуешкова Е.В.	36
ИДЕНТИФИКАЦИЯ АНОМАЛЬНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ В ЗОЛЬНЫХ ОСТАТКАХ БАННЫХ ПЕЧЕЙ СПЕКТРАЛЬНЫМИ И ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук, Серёгин М.М., Юдин А.А., Узенбаев Ф.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент, Четверикова А.Г., д-р физ.-мат. наук, доцент	39
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭКСИТОННОГО СЛОЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИСТЕМЫ «МОЛЕКУЛА - МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ НАНОЧАСТИЦА С J-СЛОЕМ» Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент	44

ПОДГОТОВКА ИНЖЕНЕРНЫХ КАДРОВ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭКСПЛУАТАЦИОННОЙ НАДЕЖНОСТИ ЛИНЕЙНЫХ УСКОРИТЕЛЕЙ В УСЛОВИЯХ СТАЦИОНАРНОГО И МОБИЛЬНОГО ТЕХНИЧЕСКОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ	Нефедов А.О., Кучаев В.Р., Бакаев А.А.	49
ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ζ -ПОТЕНЦИАЛА И РАЗМЕРА НАНОЧАСТИЦ Ag@ХИТОЗАН В ЗАВИСИМОСТИ ОТ рН МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА	Нясов П.П., Алимбеков И.Р.	53
ПРИМЕНЕНИЕ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕАКЦИИ ТРИПЛЕТ-ТРИПЛЕТНОЙ АНИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ МОЛЕКУЛ	Нясов П.П.	58
КОРРЕЛЯЦИЯ ЦВЕТОМЕТРИЧЕСКИХ И ФРАКТАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ СО СТРУКТУРНЫМИ ИЗМЕНЕНИЯМИ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ ПРИ УМЕРЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ	Цветкова Е.В.	64
ПРИМЕНЕНИЕ ВЕЙВЛЕТ-СПЕКТРОГРАММ ДЛЯ АНАЛИЗА МЕЗОСТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ	Филяк М.М., Каныгина О.Н., Четверикова А.Г., Макаров В.Н.	70
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕМОВ В ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ	Якупов Г.С.	76

РЕГИСТРАЦИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ СИГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЯ С МОЛЕКУЛАМИ КРАСИТЕЛЯ

Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, с.н.с., Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук

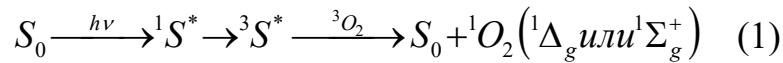
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Синглетный кислород (${}^1\text{O}_2$) играет важную роль во многих фотохимических и фото-биологических процессах, таких как процессы органического фотосинтеза, фотокатализа и фотодеградации. Он находит применение в самых различных областях, включая процессы очистки воды и воздуха, в биологии и медицине. Исследования различных механизмов генерации синглетного кислорода и их дезактивации достаточно давно и активно осуществляются во многих научных центрах [1–4].

В естественных условиях ${}^1\text{O}_2$ может вырабатываться под действием ультрафиолетового излучения, в процессе фотосинтеза и с помощью некоторых ферментов. В лабораторных и промышленных условиях его получают с помощью фотосенсибилизаторов – соединений, способных передавать энергию молекулярному кислороду, переводя его в синглетное состояние, – или напрямую, на длинах волн возбуждения триплетного кислорода [5]. Однако эффективность таких процессов зависит от многих факторов, включая тип сенсибилизатора, длину волны используемого света и среду, в которой протекает реакция [6]. Из-за короткого времени жизни ${}^1\text{O}_2$ (от наносекунд до микросекунд, в зависимости от среды) и высокой химической активности его прямое обнаружение затруднено. Таким образом, несмотря на высокий интерес к ${}^1\text{O}_2$, вопросы, связанные с его получением, стабильностью и обнаружением, остаются нерешенными. Современные исследования направлены на разработку более эффективных методов его получения и точного обнаружения, что откроет новые возможности для применения этого уникального соединения в медицине, биотехнологии и промышленности.

Настоящая работа посвящена разработке методики непосредственной регистрации синглетного кислорода по люминесцентному сигналу, формирующемуся при переходе молекул кислорода из синглетного в триплетное состояние (${}^1\text{O}_2 \rightarrow {}^3\text{O}_3$). Для получения синглетного кислорода использовалась следующая схема фотоприведений. Сенсибилизатор S_0 поглощает квант света и переходит в синглетное возбужденное состояние ${}^1\text{S}^*$. В

результате интеркомбинационной конверсии образуется триплетное состояние сенсибилизатора $^3S^*$, способного взаимодействовать с невозбужденным триплетным кислородом 3O_2 и передавать ему энергию с образованием электронно-возбужденного синглетного кислорода 1O_2 :



Синглетный кислород переходит в основное состояние либо с высвечиванием кванта люминесценции, либо безызлучательно, путем тушения люминесценции посторонними молекулами. В качестве сенсибилизатора использовался краситель – Эозина К растворенный (10^{-5} М) в диметилформамиде. Молекулы красителя возбуждались излучением полупроводникового лазера (532 нм, 5 мВт).

Для регистрации люминесцентного излучения использовался монохроматор МУМ-206 с дифракционной решёткой 600 шт/см и фотоэлектронный умножитель Hamamatsu с рабочим диапазоном 1000-1500 нм. Фотоэлектронный умножитель Hamamatsu снабжен полупроводниковым фотокатодом InGaAs и системой охлаждения (-60 С) на основе элемента Пельтье.

Для предварительной проверки работоспособности системы регистрации было проведено измерение спектра испускания ИК светодиода. Полученный результат приведен на рисунке 1.

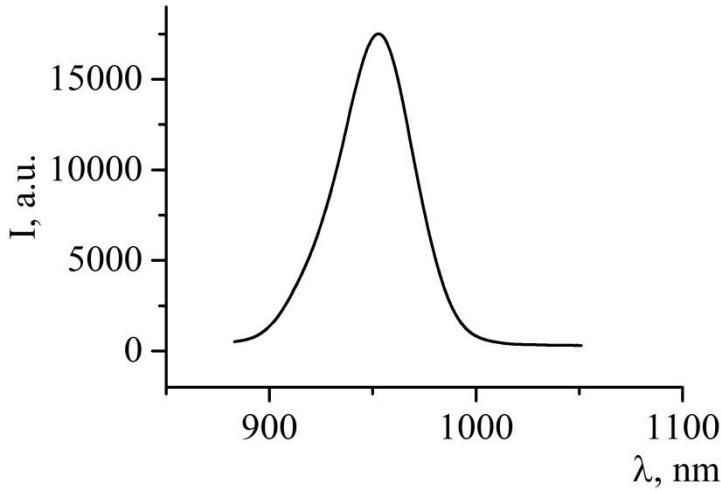


Рис.1 Спектр излучения ИК светодиода (950 нм)

При первой попытке зарегистрировать люминесценцию синглетного кислорода генерируемого по схеме 1 выяснилось наличие паразитной засветки

от второго порядка дифракции спектра люминесценции Эозина (600-620 нм) и засветки ИК компонентой рассеянного солнечного излучения.

Для исключения влияния паразитных сигналов был использован полосовой ИК светофильтр (полоса пропускания 1000-1500 нм) в совокупности с полной световой экранировкой кюветного отделения. В результате уровень темнового сигнала был доведен до условного нуля. При включении полупроводникового лазера был уверенно зарегистрирован сигнал люминесценции синглетного кислорода в области 1200-1350 нм. Полученный спектр люминесценции приведен на рисунке 2.

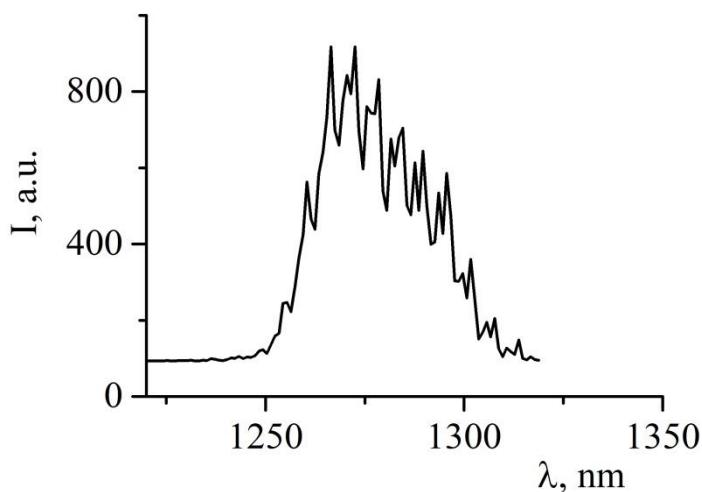


Рис. 2 Спектр люминесценции синглетного кислорода сформированного возбуждением раствора (10^{-5} М) Эозина К в диметилформамиде полупроводниковым лазером (532 нм, 5 мВт).

Полученный спектральный сигнал исчезает при выключении возбуждающего излучения полупроводникового лазера. Форма и положение спектрального максимума соответствуют известным литературным данным [6]. Сформированный измерительный комплекс может быть использован для исследований в области фотодинамической терапии.

Список литературы

1. Wang J., Leng J., Yang H., Sha G., Zhang C. Luminescence properties and kinetic analysis of singlet oxygen from fullerene solutions // J. of Luminescence. 2014. V. 149. P. 267–271.
2. Багров И.В., Белоусова И.М., Гренишин А.С., Данилов О.Б., Ермаков А.В., Киселев В.М., Кисляков И.М., Муравьева Т.Д., Соснов Е.Н. Процессы генерации синглетного кислорода в фуллеренсодержащих средах. 2. Фуллеренсодержащие растворы // Квант. электрон. 2008. Т. 38. С. 286–293.

3. Красновский А.А., мл. Фотосенсибилизированная люминесценция синглетного кислорода в растворе // Биофизика. 1976. Т. 21. № 4. С. 748–749.
4. Белоусов В.П., Белоусова И.М., Григорьев В.А., Данилов О.Б., Крисько А.В., Пономарев А.Н., Соснов Е.Н. Фотолюминесценция синглетного кислорода в растворах фуллеренов и суспензиях фуллероидов // Оptический журнал. 2001. Т. 68. № 7. С. 76–79.
5. A. Blázquez-Castro, “Direct $^1\text{O}_2$ optical excitation: A tool for redox biology,” //Redox Biology. 2017. V13. P. 39–59.
6. X. Ragàs, X. He, M. Agut, M. Roxo-Rosa, A. Gonsalves, A. Serra, and S. Nonell, “Singlet Oxygen in Antimicrobial Photodynamic Therapy: Photosensitizer-Dependent Production and Decay in *E. coli*,”// Molecules. 2013. V.18(3). P. 2712–2725.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОДХОДОВ К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАСТЕКАНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ВЫБРОСОВ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ПЛАВУЧЕСТИ

Галиаскарова Г.Р., канд. физ.-мат. наук, доцент

**Стерлитамакский филиал федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «Уфимский
университет науки и технологий»**

Аннотация. Проблема моделирования распространения атмосферных выбросов отрицательной плавучести имеет ключевое значение для оценки риска и принятия оперативных решений в случае аварийных ситуаций. В статье представлен сравнительный анализ подходов к описанию поведения тяжелых газов у земной поверхности: классической теории гравитационных течений, инженерных моделей, полевых экспериментов и отечественных моделей, построенных на основе теории «мелкой воды». Показаны физические основания, области применимости, преимущества и ограничения каждого подхода. Отдельное внимание уделено перспективам развития моделей.

Ключевые слова: тяжёлые газы; отрицательная плавучесть; гравитационные течения; «мелкая воды».

Аварийные выбросы газов и аэрозолей, плотность которых превышает плотность окружающего воздуха, формируют приземные облака отрицательной плавучести. В условиях штиля или слабого приземного ветра облака отрицательной плавучести распространяются под действием гравитационного напора с учётом конфигурации подстилающей поверхности, склонны к локализации в понижениях рельефа и со временем рассеиваются за счёт турбулентного перемешивания окружающего воздуха на верхней границе слоя. Моделирование необходимо для оперативной оценки риска, нормирования и планирования мер гражданской защиты и промышленной безопасности. За последние десятилетия сложился спектр подходов: от фундаментальной гидродинамики гравитационных течений до прикладных инженерных моделей и специализированных мелкослойных схем, ориентированных на штиль и сложный рельеф. Цель настоящей работы — дать структурированный сравнительный обзор этих подходов и обозначить траектории дальнейшего развития.

Цель настоящей работы — дать структурированный сравнительный обзор этих подходов и обозначить траектории дальнейшего развития.

Классическая теория гравитационных течений, начиная с работы Бенджамина [1] и обобщённая в исследованиях Симпсона [2], формулирует физически строгие граничные условия для переднего фронта, уравнения сохранения массы и энергии, а также масштабно-инвариантные решения, описывающие структуру течения и скорость его распространения. Эти модели обеспечивают физическую строгость и служат референсом при построении и проверке более сложных прикладных схем. Основным ограничением является их идеализированный характер: предполагается ровная поверхность, однородность плотности, пренебрежение ветровыми и геометрическими эффектами, а также отсутствие химико-фазовых превращений.

Инженерные модели, такие как SLAB, DEGADIS, HGSYSTEM/HEGADAS [3], разрабатывались для оперативного прогноза последствий аварийных выбросов. Они учитывают параметры источника (дебит, температуру, фазовое состояние), стратификацию приземного слоя и, частично, орографические особенности. Эти модели обеспечивают быструю оценку концентрации выбросов при допустимой вычислительной сложности и были верифицированы по данным полевых испытаний. Однако они чувствительны к параметризации источника и турбулентного обмена, не всегда адекватно учитывают городскую застройку и мелкомасштабный рельеф.

Полевые кампании, такие как Thorney Island, Burro/Coyote и Jack Rabbit I–II [7], обеспечили эталонные данные для валидации моделей распространения тяжёлых газов. Измерялись пространственно-временные распределения концентраций, скорость и форма фронта, времена превышения порогов токсичности. Эти эксперименты стали основой для калибровки и проверки инженерных моделей. Ограничением таких подходов являются высокая стоимость, ограниченное разнообразие условий и сложности экстраполяции результатов на иные площадки.

Отечественные разработки на основе теории «мелкой воды» формулируются как двумерные модели с усреднением по вертикали и решаются в рамках уравнений сохранения массы и импульса с учётом гидростатического давления, трения, турбулентного перемешивания [4, 5, 6]. Модели хорошо воспроизводят динамику накопления и растекания примеси в условиях штиля и сложного рельефа, применимы для построения карт риска и сценарных оценок. Вместе с тем они требуют калибровки параметров замыканий (коэффициенты трения, горизонтальной диффузии, и др.), а городской аэродинамический контур учитывается в упрощённой форме.

Сводная таблица сравнения

Подход	Преимущества	Ограничения	Перспективы
Классическая теория гравитационных течений	Строгая физическая основа	Идеализация; слабый учёт ветра, застройки	Сопряжение с моделями «мелкой воды» учёт рельефа и шероховатости
Инженерные модели (SLAB, DEGADIS, HGSYSTEM)	Быстродействие; учёт источника и стратификации; верификация	Зависимость от параметров источника; слабый учёт городской среды	Интеграция с ГИС; автоматизация ввода; расширение химико-аэрозольных модулей
Полевые кампании (Thorney, Jack Rabbit)	Репрезентативные данные; валидация моделей	Высокая стоимость; ограниченность охвата	Открытые базы; стандартизация метрик; поддержка калибровки
Модели на основе теории «мелкой воды»	Учёт рельефа и штиля; устойчивость; адаптация к сценарию	Требуют калибровки замыканий; упрощённый учёт городской аэродинамики	Гибридные цифровые двойники

В совокупности эти подходы не конкурируют, а дополняют друг друга. Для оперативной фазы аварии оптimalен двухуровневый подход: быстрый расчёт инженерной/мелкослойной моделью по реальному рельефу и, при необходимости, локальная CFD-прорисовка критических участков с учётом застройки. Классическая теория остаётся «физическими референсом» для контроля корректности фронтовых условий и масштабов.

Заключение

Сравнительный анализ показывает, что универсальной «лучшей» модели не существует: выбор инструмента определяется задачей, временем отклика и доступностью входных данных. Наиболее перспективными направлениями развития представляются: параметризация урбанистики на уровне уличных каньонов и кварталов, совместимая со моделями «мелкой воды»; асимиляция наблюдений в реальном времени (стационарные сети, мобильные платформы, дистанционное зондирование) для онлайн-калибровки коэффициентов трения, диффузии и оперативной оценки неопределённости; расширение химико-аэрозольных модулей (осаждение, многофазные эффекты, реакционные

процессы) при сохранении вычислительной эффективности; гибридные цифровые двойники.

Список литературы

1. Benjamin T. B. Gravity currents and related phenomena // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1968. — Vol. 31. — P. 209–248.
2. Simpson J. E. *Gravity Currents: In the Environment and the Laboratory*. — 2-е изд. — Cambridge: Cambridge University Press, 1997. — 244 с.
3. Hanna S. R., Dharmavaram S., Zhang J., Sykes I., Witlox H., Khajehnajafi S., Koslan K. Comparison of six widely-used dense gas dispersion models for three recent chlorine railcar accidents // *Process Safety Progress*. — 2008. — Vol. 27, No. 3. — P. 248–259.
4. Шагапов В. Ш., Мухаметшин С. М., Галиаскарова Г. Р. Распространение тяжёлых атмосферных выбросов с учётом ландшафта местности // *Инженерно-физический журнал*. — 2005. — Т. 78, № 2. — С. 99–103.
5. Shagapov V. Sh., Galiaskarova G. R. On the theory of smog spread in calm weather // *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*. — 2002. — Vol. 38, No. 1. — P. 61–69.
6. Gilmanov S., Akimov A., Galiaskarova G. On a nonlinear equation of damped oscillations beam // *International Journal of Pure and Applied Mathematics*. — 2016. — Vol. 106, No. 2. — P. 625–629.
7. Zhang J., Hanna S. R., Chang J. C. Technical evaluation of dense gas dispersion models // *Journal of Hazardous Materials*. — 2010. — Vol. 183, Issues 1–3. — P. 58–66.

ИЗУЧЕНИЕ МИКРОБНЫХ БИОПЛЕНОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

Гиндер М.В.

**Санкт-Петербургское государственное бюджетное учреждение
здравоохранения «Городская поликлиника №43»**

Микробные биопленки представляют собой сложные структурированные сообщества микроорганизмов, заключенные в экзополимерный матрикс, который обеспечивает их устойчивость к внешним воздействиям. О способности бактерий образовывать сложные бактериальные сообщества, играющие важную роль в природе, было известно давно. Однако, феномен коллективного поведения бактерий был описан в конце XX века [1]. В природе биопленки широко распространены, они влияют на человека различными способами, так как могут формироваться в естественных, медицинских и промышленных условиях у большинства бактерий. Однако биопленки на поверхности человека не всегда вредны [2]. Изучение биопленок имеет важное значение для медицины, биотехнологии и экологии. В настоящее время есть понимание, что биопленки универсальны, встречаются в водных и промышленных системах, а также в большом количестве сред и медицинских устройств. Используя такие инструменты, как сканирующий электронный микроскоп и, в последнее время, конфокальный лазерный сканирующий микроскоп, исследователи понимают, что биопленки представляют собой не бесструктурные однородные отложения клеток и скопившейся слизи, а сложные сообщества связанных с поверхностью клеток, заключенных в полимерную матрицу [3]. В данной статье рассматриваются современные физические методы исследования биопленок, включая атомно-силовую микроскопию (АСМ), конфокальную лазерную сканирующую микроскопию (КЛСМ), рамановскую спектроскопию и методы, основанные на анализе механических свойств. Обсуждаются преимущества и ограничения каждого метода, а также их применение для изучения структуры, состава и функциональных характеристик биопленок.

Обычно свободно плавающие бактерии в организме хозяина встречаются в очень маленьком количестве, тогда как основную массу бактериальных популяций представляют собой биопленки – сообщества микроорганизмов, окруженные плотной белковой оболочкой (полимерным матриксом), которую сами же бактерии вырабатывают для защиты своей колонии [4]. Микробные биопленки представляют собой одну из основных форм существования

микроорганизмов в природных и искусственных условиях. Они играют ключевую роль в инфекционных процессах, биокоррозии, очистке сточных вод и биоремедиации. Уникальные свойства биопленок, такие как повышенная устойчивость к антибиотикам и факторам окружающей среды, обусловлены их сложной трехмерной структурой и наличием внеклеточного полимерного матрикса (ВПМ). Термин «биопленки (biofilms)» предложил в 1978 г. J. W. Costerton, американский ученый канадского происхождения, в соавторстве с другими учеными [5].

Традиционные микробиологические методы (культивирование, микроскопия) не всегда позволяют получить полную информацию о морфологии и физико-химических свойствах биопленок. В связи с этим возрастает роль физических методов, обеспечивающих высокое пространственное разрешение и возможность исследования *in situ*.

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является мощным инструментом для изучения топографии и механических свойств биопленок на наноуровне. Метод основан на регистрации взаимодействия между зондом микроскопа и поверхностью образца. Преимущества АСМ: Высокое разрешение (до 0,1 нм); Возможность работы в жидкой среде, что позволяет изучать биопленки в естественных условиях; Определение адгезивных и упругих свойств. Ограничения АСМ: Трудоемкость подготовки образцов; Возможность повреждения биопленки зондом.

Конфокальная лазерная сканирующая микроскопия (КЛСМ) позволяет визуализировать трехмерную структуру биопленок с высоким разрешением. Метод основан на флуоресцентной маркировке компонентов биопленки (клеток, полисахаридов, ДНК). Преимущества КЛСМ: Возможность получения 3D-реконструкции; Неинвазивность при использовании низкоинтенсивного лазера; Совместимость с живыми клетками. Ограничения КЛСМ: Необходимость использования флуоресцентных меток; Ограниченная глубина сканирования (до 100–200 мкм).

Рамановская спектроскопия позволяет анализировать химический состав биопленок без разрушения образца. Метод основан на регистрации рассеяния света с изменением длины волны. Преимущества данного метода: Не требует подготовки образца; Возможность *in situ* исследований.

Инфракрасная спектроскопия с Фурье-преобразованием (ИК-ФП) используется для изучения молекулярного состава биопленок. Метод основан на поглощении ИК-излучения функциональными группами молекул.

Механическая стабильность биопленок играет важную роль в их устойчивости. Для ее оценки применяются: Микрореология – изучение вязкоупругих свойств; Магнитный пинцет – измерение сил адгезии.

Изучение состава и структуры мультивидовых биопленок и, в особенности, механизмов взаимоотношений входящих в них микроорганизмов, становится приоритетным направлением исследований микробных сообществ в экологии, медицине и биотехнологии. Быстрое совершенствование инструментальных методов позволяет надеяться на серьезные успехи в расшифровке этих механизмов и в разработке методов управления жизнедеятельностью природных микробных популяций [6]. Физические методы предоставляют уникальные возможности для изучения микробных биопленок, позволяя анализировать их структуру, состав и механические свойства с высоким разрешением. Комбинация нескольких методов (АСМ + КЛСМ + рамановская спектроскопия) обеспечивает наиболее полную характеристику биопленочных сообществ.

Список литературы

1. Гиндер, М.В. Биопленки / М. В. Гиндер // Наука, образование, молодежь: горизонты развития : Материалы II Национальной научно-практической конференции, Керчь, 19 марта 2022 года: ФГБОУ ВО «Керченский государственный морской технологический университет», 2022. – С. 96-100. – EDN XXJOME.
2. Гиндер, М. В. Биопленки микроорганизмов / М. В. Гиндер // Общество, образование, наука в современных парадигмах развития : Сборник трудов по материалам III Национальной научно-практической конференции, Керчь, 17–18 октября 2022 года: ФГБОУ ВО «Керченский государственный морской технологический университет», 2022. – С. 87-90. – EDN LXLEOR.
3. Гиндер, М. В. Микробные биопленки / М. В. Гиндер // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Сборник материалов Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 26–27 января 2022 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2022. – С. 2789-2793. – EDN CSWOJ.
4. Карпова, Е. П. В фокусе - биопленки! / Е. П. Карпова // Детская оториноларингология. – 2013. – № 1. – С. 34-35. – EDN RCLSOH.
5. Особенности формирования микробной биопленки при воспалительных заболеваниях пародонта / Р. О. Романова, М. Е. Кашлевская, Д. С. Левенков [и др.] // Вестник Пензенского государственного университета. – 2022. – № 1(37). – С. 19-23. – EDN YKEZIB.
6. Ножевникова, А. Н. Мультивидовые биопленки в экологии, медицине и биотехнологии / А. Н. Ножевникова, Е. А. Бочкова, В. К. Плакунов // Микробиология. – 2015. – Т. 84, № 6. – С. 623. – DOI 10.7868/S0026365615060117. – EDN UVENXN.

МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕДИЦИНЫ В ФИЗИКЕ, ХИМИИ И БИОЛОГИИ

Гиндер М.В.

Санкт-Петербургское государственное бюджетное учреждение здравоохранения «Городская поликлиника №43»

Современная медицина переживает этап трансформации, обусловленный активным внедрением методов физики, химии и биологии. Интеграция этих наук позволяет разрабатывать инновационные подходы к диагностике и лечению заболеваний. Фундаментальные исследования в области молекулярных механизмов болезней, физических принципов медицинской визуализации и химического дизайна лекарств формируют основу для прикладных медицинских технологий.

В данной статье мы проанализировали ключевые направления междисциплинарных исследований на стыке медицины, физики, химии и биологии, а также попытались оценить их перспективы в клинической практике.

Несмотря на сложность и взаимосвязь различных процессов в организме человека, практически всегда можно выделить процессы, близкие к физическим. В организме, кроме физических макропроцессов, имеют место молекулярные процессы, которые определяют поведение биологических систем [1]. Физические принципы лежат в основе современных методов диагностики: **Магнитно-резонансная томография (МРТ)** – использует явление ядерного магнитного резонанса для получения высокодетализированных изображений тканей. **Компьютерная томография (КТ)** – основана на рентгеновском излучении и алгоритмах реконструкции изображений. **Позитронно-эмиссионная томография (ПЭТ)** – применяет радиоактивные метки для визуализации метаболических процессов.

Развитие квантовых технологий открывает новые возможности, например, **квантовые сенсоры** для ранней диагностики онкологических заболеваний. Основной отличительной чертой современных квантовых технологий является выход на новый технологический уровень, позволяющий манипулировать одиночными квантовыми объектами: атомами, ионами, электронами, фотонами и другие [2].

Лазерная хирургия позволяет проводить малоинвазивные операции с высокой точностью. **Холодная плазма** используется для стерилизации ран и лечения инфекций. Исходя из общего многообразия источников лазерного

излучения выбор того или иного типа медицинской лазерной аппаратуры определяется их техническими характеристиками, целями и объемами предполагаемых лечебных операций и процедур, которые будут выполняться в конкретном медицинском учреждении определенного профиля. В частности, хирургические операции на кровенасыщенных органах и тканях наиболее эффективно выполнять с использованием лазеров с длиной волны в диапазоне 510– 580 нм. Для крупных многопрофильных клиник целесообразным является использование специально разработанных многофункциональных (универсальных) лазерных медицинских установок с импульсным режимом работы, перестраиваемой длиной волны и узкой спектральной линией излучения, которые могут быть использованы как для хирургии, так и для ФДТ и низкоинтенсивной лазерной терапии. Перспективным источником излучения для лазерной хирургии можно считать лазер на парах стронция [3].

Современная фармакология использует методы **компьютерного моделирования** (*in silico*) для предсказания активности молекул. **CRISPR-Cas9** – революционная технология редактирования генома, основанная на биохимических механизмах бактериального иммунитета. **Адресная доставка лекарств** с использованием липосом, дендримеров и наночастиц повышает эффективность терапии.

Гидрогели применяются в регенеративной медицине. **Углеродные нанотрубки** исследуются в качестве носителей противоопухолевых препаратов.

Секвенирование нового поколения (NGS) позволяет анализировать геномы пациентов для персонализированной медицины. **Иммунотерапия злокачественных новообразований (CAR-T-клетки)** основана на модификации иммунных клеток.

Микробиотоп кишечника имеет свойства органа или системы и отвечает всем требованиям, предъявляемым к системам. Это основные свойства (признаки) систем — целостность и делимость, наличие устойчивых связей, организация и эмерджентность [4]. Исследования микробиоты кишечника связывают с развитием ожирения, диабета и нейродегенеративных заболеваний.

Наука без математики совершенно бессмысленная, так как химические реакции, научные теории и детали элементов подсчитываются только с помощью математики. Математика используется в большинстве приложений, таких как работа, энергия, движение, гравитация, магнетизм и другие [5]. Идентифицировать микроорганизмы в составе бактериальных пленок позволяют современные молекулярные методы: эпифлуоресцентная микроскопия, сканирующая электронная микроскопия, конфокальная лазерная

сканирующая микроскопия, электрофорез в геле, высокоэффективная жидкостная хроматография с флуоресцентной гибридизацией *in situ* [6].

Междисциплинарные исследования объединяют достижения физики, химии и биологии, формируя новую парадигму медицины. Перспективные направления включают наномедицину, генное редактирование, искусственный интеллект и персонализированную терапию. Дальнейшее развитие этих областей требует усиления сотрудничества между учеными разных специальностей.

Список литературы

1. Гиндер, М. В. Биофизика в медицинском образовании / М. В. Гиндер, К. В. Кудашева // Социально-гуманитарные инновации: стратегии фундаментальных и прикладных научных исследований : Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции (с международным участием), Оренбург, 26–27 мая 2022 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2022. – С. 426-428. – EDN WGZDJF.
2. Басалаева, О. Г. Перспективы применения квантовых технологий в диагностике заболеваний / О. Г. Басалаева, П. С. Ситникова, А. Е. Чепкасова // Современные вопросы естествознания и экономики : сборник трудов V Международной научно-практической конференции, Прокопьевск, 16 марта 2023 года. , 2023. – С. 560-563. – EDN VTOSBN.
3. Соколов, В. В. Газоразрядные лазеры для клинической и научной медицины / В. В. Соколов, Н. М. Лепехин, Ю. С. Присеко // Лазерная медицина. – 2012. – Т. 16, № 4. – С. 55-61. – EDN PJOQBT.
4. Микрофлора кишечника как отдельная система организма / Ю. В. Юдина, А. А. Корсунский, А. И. Аминова [и др.] // Доказательная гастроэнтерология. – 2019. – Т. 8, № 4-5. – С. 36-43. – DOI 10.17116/dokgastro2019804-05136. – EDN VXOAUR.
5. Гиндер, М. В. Роль математического образования в современных образовательных системах / М. В. Гиндер, К. В. Кудашева, А. А. Талицких // Социально-гуманитарные инновации: стратегии фундаментальных и прикладных научных исследований : Материалы Всероссийской научно-практической конференции (с международным участием), Оренбург, 20–21 мая 2021 года.. – С. 325-328. – EDN TGSPQP.
6. Гиндер, М. В. Биопленки / М. В. Гиндер // Наука, образование, молодежь: горизонты развития : Материалы II Национальной научно-практической конференции, Керчь, 19 марта 2022 года: ФГБОУ ВО «Керченский государственный морской технологический университет», 2022. – С. 96-100. – EDN XXJOME.

УСПЕШНЫЙ ОПЫТ И ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОЙ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ И МЕДИЦИНСКИХ ВУЗОВ

Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доц.; Бакаев А.А.,
Говорова В.Д., Шаманская Е.В.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Аннотация: В статье рассматриваются российские практики междисциплинарной научной и проектной работы медиков, физиков и инженеров в среде вузов. Представлены результаты и перспективы совместной деятельности преподавателей и студентов кафедры медико-биологической техники ОГУ и коллективов ОрГМУ, направленной на решение прикладных задач в области здравоохранения и медицинской науки.

Ключевые слова: физика, инженерия, медицина, междисциплинарные исследования, межвузовское взаимодействие

Результаты, получаемые исследователями в фундаментальной физике, с течением времени становятся основой для развития научно-технического прогресса, направленного на благо человека, обретают прикладное значение. Одной из важнейших отраслей, где открытия и изобретения физиков преобразуются в инструмент повышения качества жизни людей, является медицина.

В России флагманом объединения инженерных технологий, физических открытий и медицинских знаний является Сеченовский университет. На базе передовых инженерных школ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и Первого Московского государственного медицинского университета имени И. М. Сеченова была открыта совместная лаборатория по разработке медицинских изделий в области робототехники и биомеханики. Первым общим продуктом лаборатории стали эндопротезы — искусственные суставы [1]. В лаборатории уделяют особое внимание исследованию воздействия технической системы на живой организм. Разработка и испытания медицинских изделий проводятся совместно инженерами и врачами-клиницистами. Рядом с лабораторией работает научно-образовательный центр «Биомеханика и медицинская инженерия». В нем реализуются проекты в образовательной, научно-исследовательской, инновационной деятельности медико-инженерного профиля [2].

В Санкт-Петербурге функционирует Региональный центр интегрированного медико-технического образования (РЦ ИМТО) на базе государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина). Центр занимается подготовкой, переподготовкой и повышением квалификации специалистов медико-технического профиля в области производства, эксплуатации и технического обслуживания медицинских изделий [3].

Успешные практики совместной научной работы медиков, физиков и инженеров в России существуют не только в федеральных, но и в региональных вузах. Они имеют различную форму организации: от общих патентов, до межвузовских центров [4-7].

Среди региональных практик особого внимания заслуживает межвузовский медико-физический центр в Челябинске [8]. Основой создания центра стали совместные исследования на стыке медицины и физики научных групп ЧГМА и ЧелГУ под руководством профессора В. Привалова и профессора А. Лаппы. Междисциплинарным коллективом получены результаты как фундаментального, так и прикладного характера в области фотодинамической терапии злокачественных опухолей. На физическом факультете ЧелГУ активное развитие получило научное направление «лазерная медицинская физика». Наиболее приоритетные изыскания относятся к области лазерной хирургии.

В Оренбургской области, как и по всей стране, активно развивается взаимодействие отраслей науки, техники и медицины. Одной из ключевых площадок для этого взаимодействия в регионе являются вузы.

Ведущие вузы региона - Оренбургский государственный университет (далее ОГУ) и Оренбургский государственный медицинский университет (далее ОрГМУ) имеют значительный опыт совместной деятельности - объединённые команды медиков и программистов создали ряд программных решений для областного здравоохранения.

В 2023 году ОГУ и ОрГМУ открыли сетевую образовательную программу «Анализ данных в медицине и здравоохранении» в рамках направления подготовки «Общественное здравоохранение».

Однако возможности совместной работы ОрГМУ и ОГУ не ограничиваются лишь сферой информационных технологий.

Одной из ключевых баз для диалога инженеров, физиков и медицинских специалистов региона уже 30 лет является кафедра медико-биологической техники (далее МБТ) физического факультета ОГУ.

Кафедра МБТ ведет образовательную, научную и практическую, в том числе хоздоговорную, деятельность с организациями, находящимися в ведении

Министерства здравоохранения, а так же, с организациями, реализующими инженерное обеспечение медицинских учреждений.

С момента организации на кафедре студенческого конструкторского бюро значительно повысилось число запросов на совместную междисциплинарную работу со стороны ряда кафедр ОрГМУ. По каждому запросу созданы проектные команды.

Исследования и разработки ведутся по таким направлениям, как медицинские изделия и техника, ИТ - технологии, медицинское моделирование, усовершенствование диагностических и терапевтических методик.

Участники студенческих научных обществ двух вузов вместе публикуют статьи, представляют доклады на конференциях, выставках, форумах. Ведется подготовка общего патента коллективов кафедры МБТ и кафедры травматологии и ортопедии ОрГМУ.

Высокий инженерный потенциал ОГУ может позволить воплотить в реальности задумки и проекты научных коллективов ОрГМУ и создавать передовые продукты и технологии.

В программе развития ОрГМУ на 2022-2030 годы прописан ряд положений, которые могут стать основой для будущего комплексного взаимодействия [9].

По результатам анализа этой программы был составлен перечень возможных совместных разработок. В него вошли медицинские изделия (мазь, применяемая в хирургической практике, гидрогелиевая пластина для лекарственного электрофореза, заместительные имплантанты), работы по усовершенствованию хирургического инструментария и эргономизации моделей ортезов и протезов, создание новых покрытий имплантов с заданными свойствами.

Возможна работа по лечебным методикам - приоритет в этой области за физиотерапевтическими методами в терапии хирургических патологий, методами терапии заболеваний пищевода с применением веществ цитопротекторного действия и низкодозовой лучевой терапией аутоиммунных поражений костей и суставов.

Среди возможных направлений совместной деятельности медиков и инженеров особое место занимают симуляционные технологии. Медицинские обучающие фантомы являются одним из перспективных продуктов научноемкого производства. Участниками СКБ уже разработаны прототипы ультразвукового фантома почки, пораженной мочекаменной болезнью, фантома костной ткани с патологиями, фантома щитовидной железы, пораженной эндемическим зобом, фантома бронхов с имитацией ожоговых повреждений и механизированный фантом трёхстворчатого клапана сердца. В перспективе на

2026 год планируется разработка фантома молочной железы с имитациями различных новообразований.

Важным для междисциплинарных разработок в сфере медицины является всестороннее обеспечение с задействованием специалистов и лабораторий различных профилей: от конструирования и испытания изделий, до материаловедения, от химии, до микробиологии.

В сфере образования совместная деятельность также открывает широкие перспективы - формы межвузовского взаимодействия могут включать проведение перекрёстных экскурсий для студентов, организацию совместных образовательных мероприятий и дискуссионных площадок, открытие сетевых программ и курсов обучения.

Актуальность исследований, разработок и образовательных инициатив на стыке медицины, инженерии и физики подтверждается не только запросами от отрасли, но и законодательными актами. Перечень приоритетных направлений для развития науки, в том числе и для междисциплинарных научно-исследовательских и проектных изысканий, представлен в Указе Президента Российской Федерации «Об утверждении приоритетных направлений научно-технологического развития и перечня важнейших научно-технических направлений» [10]. В постановлении Правительства Оренбургской области обозначены направления, приоритетные для региона [11]. Медицинские технологии занимают в этих документах одни из ключевых позиций, что позволяет планировать не только поиск грантового финансирования, но и рассчитывать на высокие показатели внедряемости создаваемых технологий в практику.

В Оренбургской области междисциплинарные научные исследования и проекты могут получить новый импульс к развитию через создание на базе ОГУ и ОрГМУ межвузовского медико-инженерного центра.

Межвузовский медико-инженерный центр, как наиболее комплексная, масштабная форма взаимодействия, может привлечь значительные объёмы финансирования и в перспективе стать центром инновационного развития региона.

Список литературы

1. Политех и Сеченовский Университет будут разрабатывать искусственные суставы // 2023. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.spbstu.ru/media/news/partnership/politekh-i-sechenovskiy-universitet-budut-razrabatyvat-iskusstvennye-sustavy/>.
 2. Научно-образовательный центр "Биомеханика и медицинская инженерия" // 2025 [Электронный ресурс] – Режим доступа:

https://www.spbstu.ru/structure/nauchno_obrazovatelnyy_tsentr biomekhanika_i_meditinskaya_inzheneriya/

3. Региональный центр интегрированного медико-технического образования (РЦ ИМТО) // 2025. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://etu.ru/ru/fakultety/fibs/sostav-fakulteta/uchebno-nauchnye-centry/rcimto/>

4. ТПУ и СибГМУ создали междисциплинарный центр медико-инженерных технологий и исследований // 2017. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://news.tpu.ru/news/tpu-i-sibgmu-sozdali-mezdisciplinarnyj-centr-mediko-inzenernyh-tehnologij-i-issledovanij/>.

5. Самарский университет им. Королева и СамГМУ создадут совместную лабораторию по биомедицинским системам // 2021. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://samsmu.ru/news/2021/0902/>.

6. В межвузовском кампусе в Башкирии будут производить биомедицинские имплантанты // 2023. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://nauka.tass.ru/nauka/19093651>.

7. Совместная разработка медиков и инженеров будет представлена на III Конгрессе молодых ученых // 2023. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://ilizarov.ru/new/sov mestnaa-razrabotka-medikov-i-inzenerov-budet-predstavlena-na-iii-kongresse-molodyh-ucenyh>.

8. Медицина, робототехника, защита данных: физический факультет ЧелГУ готовит специалистов будущего // 2021. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.csu.ru/Lists/List1/newsitem.aspx?ID=4630>

9. Программа развития федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Оренбургский государственный медицинский университет" Министерства здравоохранения Российской Федерации на 2022-2030 годы. Оренбург, 2022 год.

10. Указ Президента Российской Федерации от 18 июня 2024 г. №529 «Об утверждении приоритетных направлений научно-технологического развития и перечня важнейших научно-технических направлений».

11. Постановление Правительства Оренбургской области от 7 декабря 2006 года №394-п «О приоритетных направлениях развития науки, технологий и техники в Оренбургской области» (с изменениями на 27 марта 2020 года).

КРОСС-АННИГИЛЯЦИЯ МОЛЕКУЛ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА С ТРИПЛЕТНЫМИ ЦЕНТРАМИ ПОЛИАМФОЛИТНОЙ ЦЕПИ НА ЗАРЯЖЕННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЕ

**Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Аннотация: рассмотрена композитная наносистема, состоящая из заряженной сферической плазмонной наночастицы и адсорбированной на ней полиамфолитной полимерной цепи с закрепленными на ее звеньях электронно-возбужденными триплетными органическими молекулами. Предложена математическая модель кинетики кросс-аннигиляции Т-центров с участием молекул синглетного кислорода, учитывающая радиально-неоднородное распределение фрагментов полимерной цепи. Показано влияние заряда наночастицы на формирование радиального распределения Т-центров и кинетику кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции, инициированной молекулярным кислородом.

Ключевые слова: *кросс-аннигиляция, замедленная флуоресценция, полиамфолит, адсорбция, металлическая наночастица*

В настоящее время перспективным подходом является создание гибридных систем из нескольких функционально и структурно взаимосвязанных наноразмерных компонентов. В таком качестве для биологических и медицинских приложений рассматриваются наносистемы, образованные коньюгатами металлических наночастиц и полимерными (белковыми) макромолекулами. Так, в [1-3] обсуждаются перспективы использования плазмонных наночастиц с оболочкой из бычьего сывороточного альбумина как основания для доставки фармакологических средств. Исследуется функционализация подобных наносистем для медицинских применений с учетом необходимой биосовместимости [4], влияние полиэлектролитов на увеличение чувствительности иммунофлуоресцентного анализа [5] и пр. Очевидно, что физические механизмы управления процессами в подобных наносистемах, представляют значительный научный интерес.

В работах [6-7] показано, что одним из таких механизмов может выступать электростатическое взаимодействие заряженной наночастицы и полиамфолитной полимерной макромолекулы, когда электрический заряд

наночастицы определяет пространственное распределение адсорбированных полимерных звеньев. В случае, когда звенья полимерной цепи выступают в качестве агрегатов для триплетных молекул сенсибилизатора и рассматриваемая система предполагается кислородопроницаемой, кинетика кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции Т-центров становится чувствительной к заряду наночастицы.

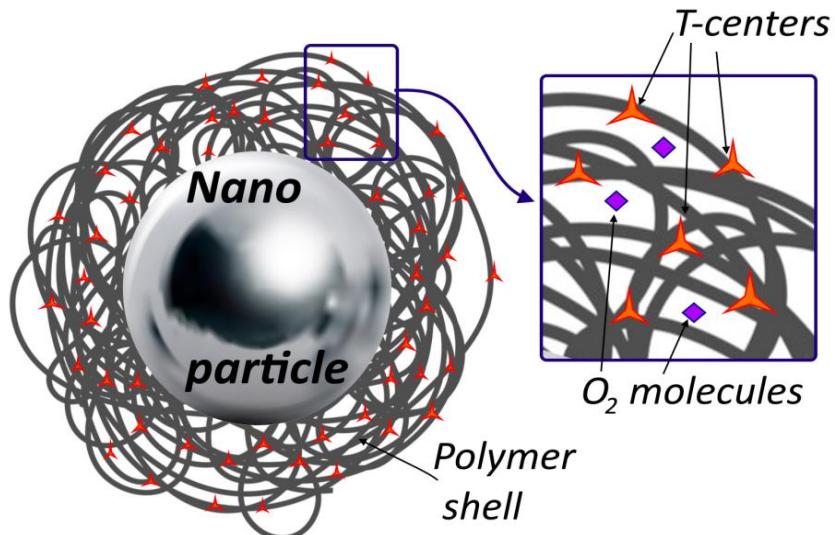


Рисунок – 1 Система «Наночастица-адсорбированная полимерная цепь - Т-центры-молекулярный кислород»

Радиальная плотность мономеров $n(r) = \psi^2(r)$ адсорбированной макроцепи в ее равновесной конфигурации задается конформационной функцией $\psi(r)$, которая выражается через модифицированные функции Бесселя первого $I_\nu(q_0 r)$ и второго $K_\nu(q_0 r)$ рода с индексом бесселевых функций $\nu = \sqrt{1/4 - \gamma}$ – величины, отражающей степень взаимодействия заряда НЧ с диполем p звена полиамфолита $\gamma = -\frac{6p|Q|}{a^2 kT}$.

В этом случае радиальные функции $\psi(\mathbf{r}) = F_\nu(r)$ определены внутри сферического слоя $R < r < r_0$ и в сопряженной с ним области $r > r_0$

$$\begin{cases} F_\nu^I(r) = A \left[\frac{I_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_\nu^{II}(r) = A \left[\frac{I_\nu(q_0 r_m)}{K_\nu(q_0 r_m)} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \right] \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (1)$$

Как следует из расчетов по данной модели, пространственное распределение звеньев полимерной цепи (следовательно, и конъюгированных с ними Т-центров) существенно зависит от заряда наночастицы (рис. 2-3).

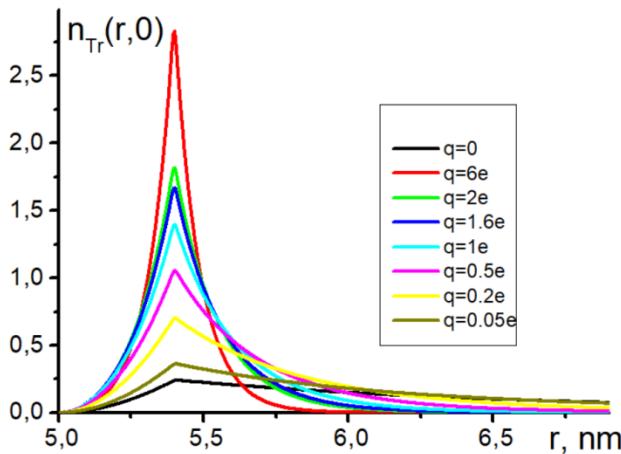


Рисунок 2 – Начальное распределение Т-центров при различном заряде НЧ

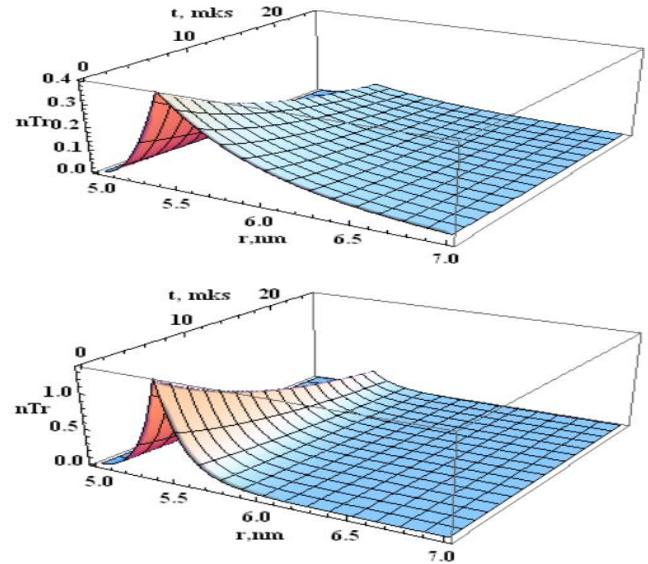
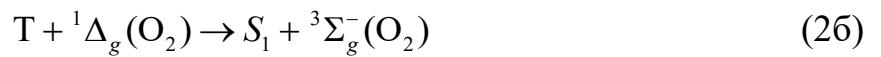
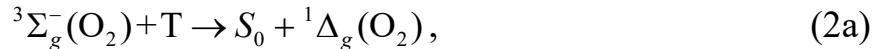


Рисунок 3 – Пространственно-временная динамика Т-центров $q=0$ (верхний) и $q=1e$ (нижний) графики

В кислородопроницаемых системах получают развитие двустадийные молекулярные процессы [7-9]



– с участием триплетных (T) молекул и молекул O_2 . Так, в сферически симметричном случае формирования опушечного слоя на НЧ, кинетический этап (2a) представляется квазиэкспоненциальной временной зависимостью плотности $n_T(r,t)$ Т-сенсибилизаторов

$$n_T(r,t) = \eta n(r) \exp \left[-\frac{t}{\tau_T} - 4\pi r_m D_m^\Sigma n_{ox} \left(t + 2r_m \sqrt{\frac{t}{\pi D_m^\Sigma}} \right) \right], \quad (3)$$

где $\eta n(r)$ – начальный радиальный профиль Т-возбуждений, пропорциональный с коэффициентом $\eta < 1$ радиальному распределению звеньев макроопушки; D_m^Σ - коэффициент микродиффузии невозбужденных молекул O_2 в макроцепном опушечном слое; τ_T - время жизни Т-состояния; r_m - радиус реакции тушения Т-центра невозбужденной молекулой кислорода. При выводе (3) и последующих выражений для скоростей реакций (2) используются представления о квазиконтактном реагировании молекул T и $^3\Sigma_g^-(O_2)$.

Диффузионная радиальная функция Грина молекул синглетного кислорода $G_{\Delta}(r, r'; t - \tau)$ активированного точечным источником, локализованным на сегменте макроцепи, связанного с ним Т-сенсибилизатора с граничным условием второго рода на сфере радиуса R имеет вид [10-11]

$$G_{\Delta}(r, r', t - \tau) = \frac{1}{8\sqrt{\pi^3 D_{\Delta}(t - \tau)}} \frac{1}{rr'} \left\{ \exp\left[-\frac{(r - r')^2}{4D_{\Delta}(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(r + r' - 2R)^2}{4D_{\Delta}(t - \tau)}\right] - \frac{\sqrt{4\pi D_{\Delta}(t - \tau)}}{R} \exp\left[\frac{D_{\Delta}(t - \tau)}{R^2} + \frac{r + r' - 2R}{R}\right] \left\{ 1 - \Phi\left[\frac{r + r' - 2R}{\sqrt{4D_{\Delta}(t - \tau)}} + \frac{\sqrt{D_{\Delta}(t - \tau)}}{R}\right] \right\} \right\}, \quad (4)$$

где $\Phi(q)$ – интеграл вероятности.

В случае симметричных сферических наночастиц, и пренебрежения аннигиляционным слагаемым, удается получить точное аналитическое решение для плотности $n_{\Delta}(r, t)$ в квадратурах

(5)

$$n_{\Delta}(r, t) = 4\pi r_m D_m^{\Sigma} n_{ox} \exp(-t / \tau_{\Delta}) \int_0^t \exp(\tau / \tau_{\Delta}) \int_R^{\infty} n_T(\rho, \tau) G_{\Delta}(r, \rho, t - \tau) 4\pi \rho^2 d\rho d\tau$$

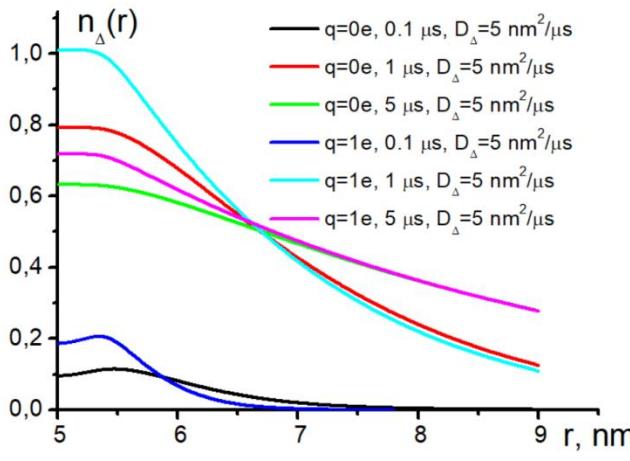


Рисунок 4 – Пространственное распределение молекул кислорода около незаряженной и заряженной ($q=1e$) НЧ в различные моменты времени

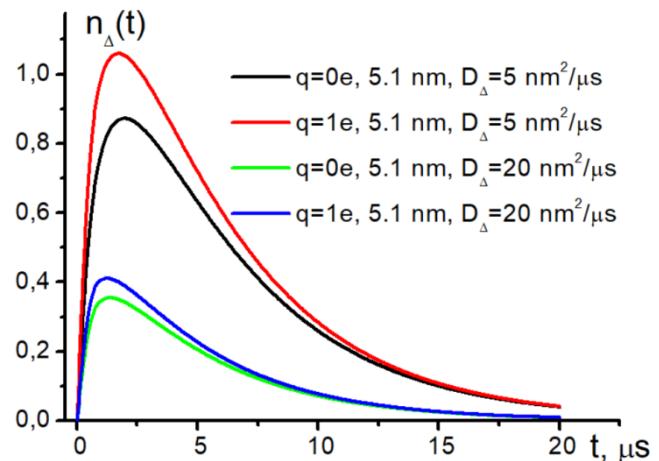


Рисунок 5 – Кинетика концентрации молекул кислорода около незаряженной и заряженной ($q=1e$) НЧ при различных коэффициентах их диффузии

Из рисунка 4 видно, что пространственное распределение молекул кислорода немонотонно на начальном этапе времени, на расстоянии 0,4 нм от поверхности НЧ наблюдается локальный максимум распределения

соответствующий максимуму пространственного распределения Т-центров. При малых коэффициентах диффузии этот максимум проявляется более явно. С течением времени приповерхностная область диффузионно заполняется и кривая становится монотонно спадающей с увеличением расстояния от поверхности НЧ.

Кинетика концентрации молекул кислорода (рис. 5) имеет характерный вид кривой с максимумом, где от 0 до 1-2 мкс занимает стадия нарастания, а затем следует уменьшение концентрации. Вблизи поверхности НЧ кинетические кривые практически не отличаются, а на периферии уменьшаются по амплитуде и немного затягиваются во времени. С ростом коэффициента диффузии молекул O_2 уменьшается амплитуда временные параметры кинетических кривых. Заряд НЧ влияет, главным образом, на амплитуду концентрации возбуждений O_2 и, незначительно, на положение максимума кинетической кривой и эффективное время ее затухания.

Процесс кросс-аннигиляции молекулярных возбуждений сопровождается замедленной флуоресценцией (ЗФ) сенсибилизатора. При фотоактивации системы ультракоротким лазерным импульсом форма импульса $I_{DF}^{T\Delta}(t)$ кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции определяется как интеграл по объему области пространства, заполненному макроцепями, от произведения концентраций (сферическая симметрия) $n_T(r,t)$ триплет-возбужденных органических молекул, $n_\Delta(r,t)$ синглетных возбуждений молекул O_2 и радиационного фактора $N(\omega|r)/\Gamma(\omega|r)$, трансформированного плазмонным полем сферической НЧ.

$$I_{DF}^{T\Delta}(t|\omega) \sim K_\Delta(t) \int_R^\infty n_T(r,t) n_\Delta(r,t) N(\omega|r) / \Gamma(\omega|r) 4\pi r^2 dr. \quad (6)$$

Расчеты по формуле (6) показывают, что кинетика замедленной кросс-аннигиляционной флуоресценции Т-центров существенным образом зависит от заряда наночастицы (посредством зависимости от начального распределения Т-центров). Так (рисунок 6), с увеличением заряда НЧ возрастает амплитуда люминесцентного сигнала и сокращается его длительность, как на этапе нарастания, так и на стадии релаксации.

Таким образом, для композитной наносистемы, состоящей из заряженной сферической плазмонной наночастицы и адсорбированной на ней полиамфолитной полимерной цепи, с электронно-возбужденными Т-молекулами реализована математическая модель кинетики кросс-аннигиляции Т-центров с молекулами синглетного кислорода. Установлено влияние заряда наночастицы на радиальное распределение Т-центров, а также кинетику кросс-

аннигиляционной замедленной флуоресценции, инициированной молекулярным кислородом.

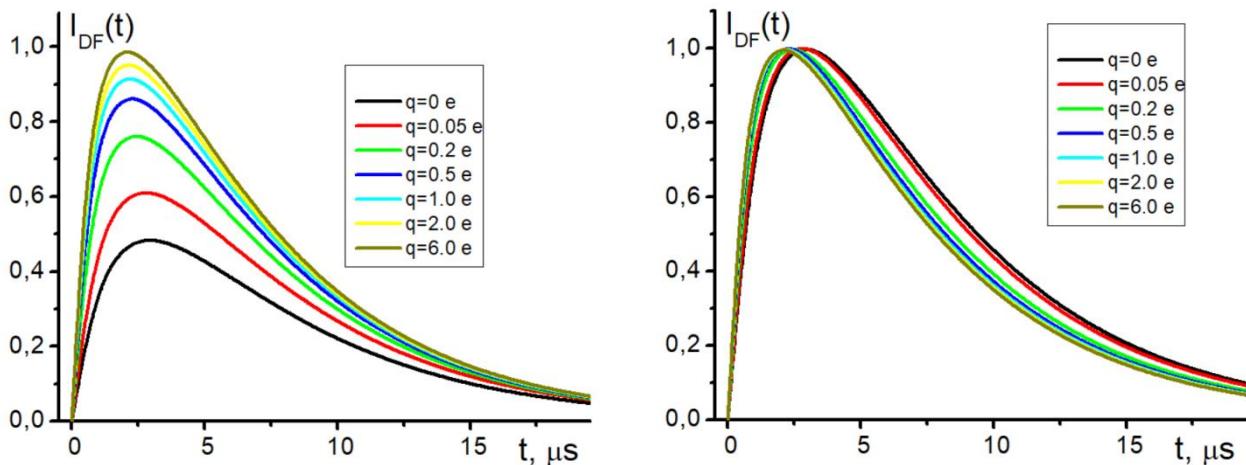


Рисунок 6 – Кинетика сигналов замедленной кросс-аннигиляционной флуоресценции Т-центров в опушечном полимерном слое при различном заряде наночастицы. Графики справа нормированы на единицу

Исследование выполнено по Государственному заданию Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на проведение научно-исследовательских работ № FSGU-2023-0003, и при поддержке гранта на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технического развития № 075-15-2024-550.

Список литературы

1. Sergio Dominguez-Medina, Steven McDonough, Pattanawit Swanglap, Christy F. Landes and Stephan Link In Situ Measurement of Bovine Serum Albumin Interaction with Gold Nanospheres // *Langmuir* 2012, 28, 24, 9131–9139
2. Zheng-Fen Pu, Jun Peng, Qiu-Lin Wen and Yu Li Photocatalytic synthesis of BSA-Au nanoclusters with tunable fluorescence for highly selective detection of silver ion // *Dyes and Pigments*, 2021, Volume 193 58.
3. Cristian R.Lillo, M. Natalia Calianni, Belen Rivas Aiello and M. Jimena Prieto BSA-capped gold nanoclusters as potential theragnostic for skin diseases: Photoactivation, skin penetration, in vitro, and in vivo toxicity // *Materials Science and Engineering: C*, 2020, Volume 112 61.
4. Aswathy Ravindran Anupam Singh and Ashok M.Raichur Studies on interaction of colloidal Ag nanoparticles with Bovine Serum Albumin (BSA) // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2014, Volume 76, Issue 1, Pages 32-37.
5. Mel'nikova Ya.I., Kulakovich O.S., Ramanenka A.A., Maskevich S.A. Influence of polyelectrolytes on increasing sensitivity of an immunofluorescent analysis

- based on plasmon silver nanoparticles. Journal of the Belarusian State University. Biology. 2020. T.3 C. 72–80. <https://doi.org/10.33581/2521-1722-2020-3-72-80>.
6. Кучеренко М. Г., Неясов П. П., Кручинин Н. Ю. Моделирование конформационных перестроек макромолекулы, адсорбированной на поверхности металлической наночастицы, во внешнем эл. поле // Химическая физика, 2023, том 42, № 5, с. 1–10.
 7. Кучеренко М.Г., Русинов А.П., Кручинин Н.Ю. Плазмонное управление люминесценцией молекул в структуре адсорбированной полимерной цепи на поверхности заряженной сферической наночастицы // Оптика и спектроскопия. 2024. -Том 132. - № 5. - С. 566-575.
 8. Кучеренко М.Г., Кручинин Н.Ю. Форма импульса замедленной флуоресценции, сопровождающей молекул.реакцию // Матер. Межд. Конфер. « Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент». Караганда: Караганда: КарГУ. 2019 г. – С. 133- 139.
 9. Kucherenko M.G., Penkov S.A. Triplet exciton reactions in MEH-PPV films registered by accompanying magneto-sensitive photolum. // J. Photochem. & Photobiol., A: Chemistry. 437 (2023) 114440. 1010-6030/© 2022 Elsevier B.V. doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114440.
 10. Kucherenko M. G., Izmodenova S. V., Kruchinin N. Yu., Chmereva T. M. Change in the Kinetics of Delayed Annihilation Fluorescence During Rearrangement of Polymer-Chain Structure in a Nanocavity of a Solid Adsorbent // High Energy Chemistry, 2009, Vol. 43, No. 7, pp. 592–598.
 11. Кучеренко М.Г., Измоденова С.В., Чмерева Т.М., Кручинин Н.Ю., Подрезова Н.С. Кинетика диффузионно-контролируемых фотопрессий в приповерхностном слое фуллерен-тубуленовой наночастицы с адсорбированной полимерной цепью // Вестник ОГУ. 2013. №9 (158). С. 100-109.
 12. Кучеренко М.Г. Кинетика нелинейных фотопрессов в конденсированных молекулярных системах. Оренбург: ОГУ. 1997, - 386 с.

ОСОБЕННОСТИ АНИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ МОЛЕКУЛ И ЭКСИТОНОВ В НАНОСИСТЕМАХ

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Пеньков С.А., канд. физ.-мат. наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Бимолекулярные реакции в наноструктурированных системах приобретают специфические особенности, отражающие морфологию таких систем [1-2]. Аннигиляция электронных возбуждений, локализованных на молекулах, или способных перемещаться в объеме нанокристалла экситонов, представляет собой пример такой реакции. При взаимной аннигиляции триплетных (T) экситонов (T-T-аннигиляция – TTA) со скоростью $U_{ann}(r)$, либо их аннигиляции с триплет-возбужденными молекулами, локализованными в приповерхностной области наноячейки, необходимо учитывать, что такая реакция TTA является спин-селективной. По этой причине ее скорость зависит от внешнего магнитного поля индукции B . Другой вариант магниточувствительности возникает в случае реакции тушения T- экситонов молекулами тушителя в дублетном спиновом состоянии, или невозбужденными молекулами O_2 – триплетами [3].

Адсорбированная на поверхности нанокристалла полимерная цепь с закрепленными на ее звеньях функциональными органическими молекулами, представляет собой еще один пример надмолекулярной наноконструкции [1-2]. T-экситоны в такой системе способны вступать в реакцию с молекулами, локализованными на макроцепи. В этом случае реакция с молекулами из макроцепной короны протекает по дистанционному механизму, без стадии тесного контакта, и ей присуща специфическая кинетика [4], в связи с неоднородным размещением реагента в структуре полимера. Математическая модель TTA в кристалл-полимерной наноструктуре во внешнем магнитном поле, предложенная в работе [5], учитывала спиновую селективность реакции TTA, неоднородное распределение звеньев полимерной цепи, а также дистанционное тушение T-экситонов локализованными центрами макроцепной опушки.

Для скорости $K(t|r')$ спин-селективной аннигиляции триплетных состояний можем записать

$$K(t) = \int_{r < R} U_{ann}(r) \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{P}_s, \hat{\rho}(r, t | B) \right\}_+ d^3 r, \quad (1)$$

$$\text{где } \text{Tr} \left\{ \hat{P}_s, \hat{\rho} \right\}_+ = \sum_{J, M} \langle JM | (\hat{P}_s \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{P}_s) | JM \rangle = \langle 00 | \hat{\rho} | 00 \rangle, \text{ а } \hat{P}_s = |00\rangle\langle 00|$$

оператор проектирования на синглетное спиновое состояние Т-Т-пары; $|JM\rangle$ – базисные состояния суммарного электронного спина $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ Т-Т-пары.

Спин-гамильтониан Т-Т-пары $\hat{H}(r)$ двух различных молекул имеет вид

$$H(r) = g_1 \mu_B B S_{1Z} + g_2 \mu_B B S_{2Z} - 2J_{exc}(r') \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_1 \mathbf{D}(\Omega_1) \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 \mathbf{D}(\Omega_2) \mathbf{S}_2. \quad (2)$$

В гамильтониан (2) включены зеемановские взаимодействия одиночных триплетов Т-Т-пары с различными g-факторами g_1 и g_2 с однородным магнитным полем индукции B , межмолекулярное обменное взаимодействие с характерным интегралом $J_{exc}(r')$, а также внутритриплетные спин-спиновые взаимодействия, отображенные векторными операторами $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ электронных спинов молекул 1 и 2 и тензорами $\mathbf{D}(\Omega_{1(2)})$ тонкой структуры; $\Omega_{1(2)}$ – угловые конфигурации молекулярных оставов, μ_B – магнетон Бора.

В приближении относительной независимости пространственной и спиновой динамики [6-7] и центральной локализации в НЧ одного экситона уравнение для спинового оператора плотности $\hat{\rho}(r, t)$, не содержащее производных по координатам, приводится к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(r, t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(r), \hat{\rho}(r, t)] - \Gamma_2(r, t) \hat{\rho}(r, t) - \frac{1}{2} U_{ann}(r) \{ \hat{\rho}(r, t) \hat{P}_s + \hat{P}_s \hat{\rho}(r, t) \}. \quad (3)$$

Функция $\Gamma_2(r, t)$ в (3) представляет собой не зависящую от спина скорость квазимономолекулярного распада Т-Т-пары, которая сохраняет в себе зависимости от радиуса r , и времени t . В случае реакции аннигиляции триплетных возбуждений по синглетному каналу получаем

$$\hat{\rho}(r, t) = \exp \left[- \int_0^t \Gamma_2(r, t') dt' \right] \exp(\hat{K}t) \hat{\rho}(r, 0) \exp(\hat{K}^* t), \quad (4)$$

где неэрмитов эволюционный оператор определен нами ранее в работах [8-9]

$$\hat{K}(B | r) = -\frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}(B | r) - i \frac{\hbar}{4} U_{ann}(r) \hat{P}_s \right). \quad (5)$$

В случае, когда оба Т-экситона подвижны и пространственно слабо скоррелированы, двухчастичная диффузионная функция Грина $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ сводится к произведению одиночстичных функций $G_1(\mathbf{r}_1, t)$: $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \rightarrow G_1(\mathbf{r}_1, t) G_1(\mathbf{r}_2, t)$. Функция Грина $G_1(r, r', t)$ для уравнения диффузии

Т-эксситона удовлетворяет граничному условию отражения от непроницаемой поверхности нанокристалла.

Тогда скорость $K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ бимолекулярной реакции ТТА эксситонов представляется следующими интегралами от парной плотности $\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ [7]

$$K(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2') = \int_0^\infty dt \iint_{V_R} U_{ann}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \text{Tr} \left\{ \hat{P}_S, \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \right\}_+ G_1(\mathbf{r}_1, t | \mathbf{r}_1') G_1(\mathbf{r}_2, t | \mathbf{r}_2') d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (6)$$

При наличии адсорбированной на сфере макроцепи функция $\Gamma_2(r', t)$ представляет собой не зависящую от спина скорость распада Т-Т-пары в результате конечного времени τ_T жизни Т-эксситона, а также статического тушения каждого из них – как подвижного, так и локализованного, совокупностью молекулярных Q-центров, размещенных на макроцепи. Для скорости $\Gamma(r', t)$ тушения нецентрального Т-эксситона в положении \mathbf{r}' можем записать

$$\Gamma(r', t) = \frac{1}{\tau_T} + n_Q \int_R^\infty \int_0^\pi f(r) U(\rho) \exp[-U(\rho)t] 2\pi \sin \theta d\theta r^2 dr, \quad (7)$$

а для скорости $\Gamma(0, t)$ дезактивации Т-эксситона, локализованного в центре шара получаем

$$\Gamma(0, t) = \frac{1}{\tau_T} + n_Q \int_R^\infty f(r) U(r) \exp[-U(r)t] 4\pi r^2 dr. \quad (8)$$

Общая скорость $\Gamma_2(r', t)$ неаннигиляционного распада Т-Т-пары эксситонов представляет собой сумму скоростей (7) и (8): $\Gamma_2(r', t) = \Gamma(r', t) + \Gamma(0, t)$.

Радиальное распределение $f(r)$ плотности звеньев опушки повторяется в радиальном профиле плотности Q-центров: $n_Q(r) = \eta f(r)$, $\eta = \text{const}$.

Равновесные конфигурации адсорбированной макроцепи определяются конформационной функцией $\psi(\mathbf{r})$, связанной с плотностью мономерных звеньев соотношением $f(r) = \psi^2(r)$. В модели потенциала «твердая стенка – дельта-функциональная яма» $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha \delta(r - r_0)$ радиальные функции $\psi(r) = F_0(r)$ в области $R < r < r_0$ и вне ее $r > r_0$ получены ранее, например, в [4] и [10].

$$\begin{cases} F_0^I(r) = A_0 \left[\frac{I_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)} \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_0^{II}(r) = A_0 \left[\frac{I_{1/2}(q_0 r_0)}{K_{1/2}(q_0 r_0)} - \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)} \right] \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (9)$$

где $I_{1/2}(q_0 r)$ и $K_{1/2}(q_0 r)$ – модифицированные функции Бесселя первого и второго рода с полуцелым индексом, а собственные числа $q_0^2 = -\frac{6\varepsilon_0}{a^2 kT}$ находятся из уравнения

$$\frac{a^2 kT}{6\alpha r_0} = I_{1/2}(q_0 r_0) K_{1/2}(q_0 r_0) - K_{1/2}^2(q_0 r_0) \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)}.$$

В случае расщепления синглетного экситона на два триплетных в магнитном поле возникает зависимость интенсивности фотолюминесценции нанокристаллов тетрацена от индукции В поля, в результате присутствия стадии ТТА в процессе [11]. На рис. 1 представлены экспериментальная и расчетные кривые зависимостей разности интенсивностей свечения в магнитном поле и в его отсутствие для нанокристаллов тетрацена в пленке поливинилового спирта.

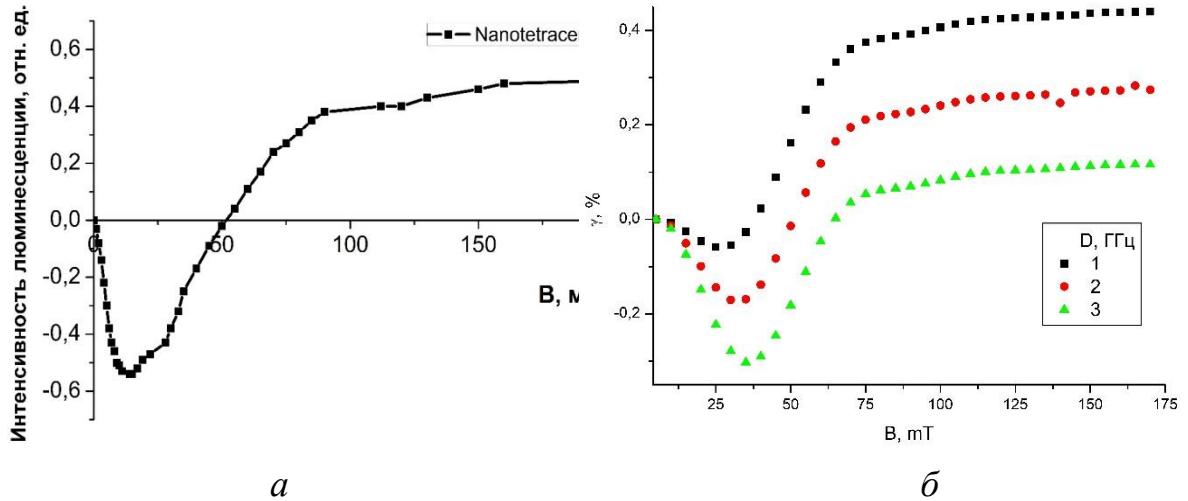


Рис. 1. Магнитополевая зависимость разности $I(B)-I(0)$ интенсивностей фотолюминесценции нанокристаллов тетрацена в матрице поливинилового спирта (a). Расчетные зависимости изменения интенсивности свечения нанокристалла от индукции В магнитного поля при варьировании параметра D тонкой структуры триплета (б).

Построение решения спиновой части задачи производится на основе динамического уравнения (3) с гамильтонианом (2), либо на основе релаксационной модели [12], использующей уравнение Редфильда для

спиновой матрицы плотности экситонной пары. Обычно расчет спиновой динамики производится во втором порядке по внутритриплетному спин-спиновому взаимодействию [6].

Рассмотренные модели спиновой и молекулярной динамики могут использоваться для обработки результатов эксперимента, требующего учета особенностей конформационной структуры полимерных макроцепей, адсорбированных на поверхностях сферических кристаллических наночастиц с молекулярными Т-экситонами и локализованными на макроцепи Т-центрами.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2023-0003.

Список литературы

1. Кучеренко М. Г., Кручинин Н. Ю., Неясов П.П., Алимбеков И.Р. Молекулярные процессы вблизи поверхности плазмонных и магнитных сфероидальных наночастиц с макромолекулярной опушкой // Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры [Электрон. ресурс] Оренбург: ОГУ, 2022. С. 2841-2848.
2. Кучеренко М.Г., Неясов П.П. Магнитный эффект триплет-триплетной аннигиляции электронных возбуждений в структуре адсорбированной макромолекулы // Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образ. [Электрон. ресурс] Оренбург: ОГУ, 2024. С. 3435-3443.
3. Kucherenko M.G., Penkov S.A. Triplet exciton reactions in MEH-PPV films registered by accompanying magneto-sensitive photoluminescence // Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry. 437 (2023) 114440. 1010-6030/© 2022
4. Кучеренко М. Г., Неясов П. П., Кручинин Н. Ю. Моделирование конформационных перестроек макромолекулы, адсорбированной на поверхности металлической наночастицы, во внешнем электрическом поле // Химическая физика. – 2023. – Том 42. – № 5. – С. 1–10.
5. Кучеренко М.Г., Пеньков С.А. Магнитный эффект в аннигиляции триплетных экситонов сферического нанокристалла с адсорбированной полимерной цепью // Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. Универ. комплекс как регион. центр образ. Оренбург: ОГУ, 2025. С. 3359-3367.
6. Кучеренко М. Г., Пеньков С. А. Особенности детектирования магнитного резонанса реакций триплетных молекул по аннигиляционной замедленной флуоресценции в наноструктурированных средах // Химическая физика и

мезоскопия. 2019. Том 21, №2. С. 278- 289.

7. *Kucherenko M.G., Penkov S.A., Neyasov P.P.* Diffusion-controlled annihilation reactions in 2D and 3D nanostructures // Materials Today: Proceedings. 2022. 71. pp. 124-129.
8. *Kucherenko M.G., Neyasov P.P.* Spin-selective interaction of triplet-excited molecules on the surface of a ferromagnetic nanoparticle // Eurasian Physical Technical Journal. 2022, Vol.19, No.4 (42). –P.5-16.
9. *Кучеренко М. Г., Неясов П. П.* Особенности спиновой динамики и аннигиляции триплетных молекулярных возбуждений в нанореакторах с ферромагнитными частицами // Химич. физика и мезоскоп. 2018. Т. 20, № 1. С. 33-48.
10. *Кучеренко М.Г., Русинов А.П., Кручинин Н.Ю.* Плазмонное управление люминесценцией молекул в структуре адсорбированной полимерной цепи на поверхности заряженной сферической наночастицы // Оптика и спектроскопия. 2024. -Том 132. - Вып. 5. - С. 566-575.
11. *Kucherenko M.G., Penkov S.A.* Magnetically dependent photoluminescence of tetracene nanoparticles // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2025, 16 (4), 1–8. <http://nanojournal.ifmo.ru>. DOI 10.17586/2220-8054-2025-16-4-1-8
12. *Atkins P.W., Evans G. T.* - Molecular Physics. – 1975. - V. 29. -№ 3. P. 921-935.

СВЕТОЧУВСТИТЕЛЬНОСТЬ ОПТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА БИОХРОМ НА ОСНОВЕ БАКТЕРИОРОДОПСИНА

Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, с.н.с., Раздобреев Д.А., канд. хим. наук, Графкина А.Е., Чуешкова Е.В.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Аннотация: Представлены спектры поглощения фотохромного пленочного материала «Биохром» на основе бактериального родопсина. При облучении излучением непрерывного лазера с $\lambda = 532$ нм происходит просветление образца. Оценивалась светочувствительность пленки и кинетические характеристики восстановления окраски материала.

Ключевые слова: фотохромизм, Биохром, спектр поглощения, светочувствительность.

Регистрирующие среды на основе светочувствительного белка бактериородопсина (БР), обладающие высокими разрешающей способностью, чувствительностью и цикличностью, интенсивно изучались в последние десятилетия при разработке систем оптической обработки информации. Важность изучения характеристик таких сред сохраняется и в настоящее время [1], [3-6].

В данной работе приведены некоторые результаты исследования фотохромных свойств образца регистрирующего материала Биохром на основе БР после продолжительного (более 30 лет) хранения.

Спектры поглощения регистрировали на оптоволоконном спектрометре AvaSpec 2048 (Avantes). Спектр поглощения необлученного светоадаптированного БР в образце имеет максимум при 558 нм и в целом совпадает с приведенными в литературе [2].

При облучении образца излучением непрерывного лазера с $\lambda = 532$ нм (КЛМ-532, Оптроник) происходит его обратимое обесцвечивание. Молекулы бактериородопсина при этом переходят в лабильную светоиндуцированную форму (т.н. «форма В» [2]).

Серия спектров пленки Биохром, полученных при облучении образца с интервалом 1 с представлена на рисунке 1.

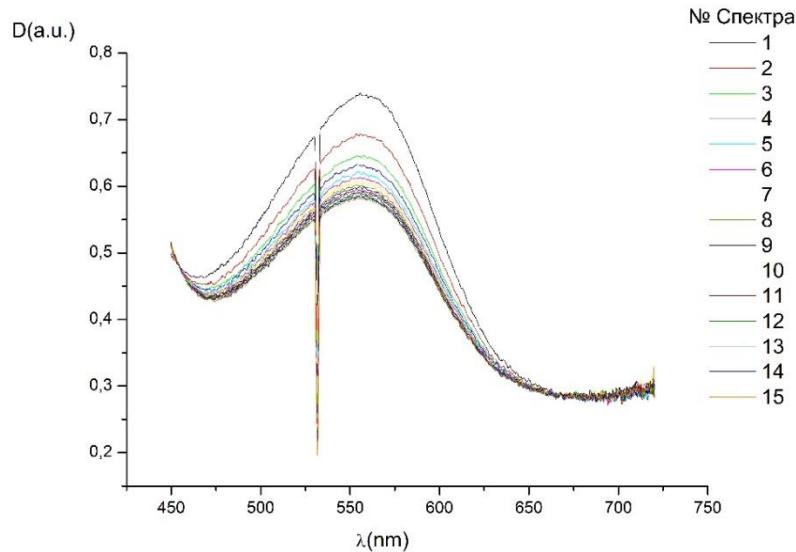


Рисунок 1. – Динамика обесцвечивания пленки Биохром при облучении на $\lambda=532$ нм. Каждый последующий спектр регистрировался с интервалом 1 с.

Из серии спектров строилась кинетическая кривая просветления образца, т.е. график $D=f(t)$ как функция изменения оптической плотности пленки на длине волны максимума спектра поглощения БР ($\lambda=560$ нм) от времени по мере обесцвечивания образца (рисунок 2).

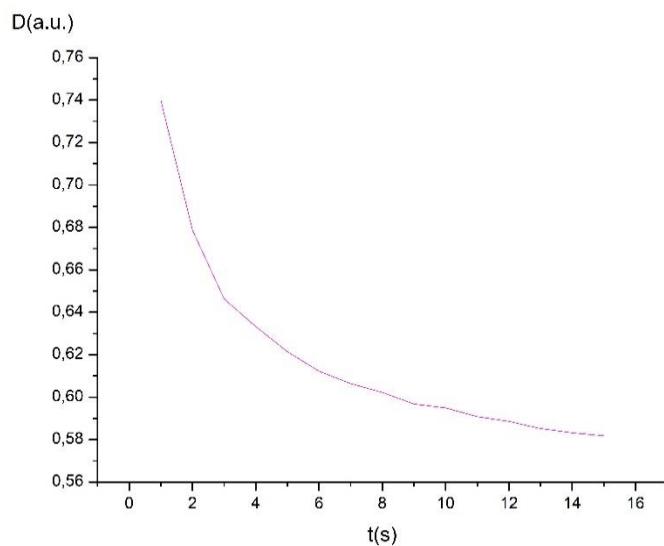


Рисунок 2. – Кривая просветления пленки Биохром при оптической записи

Кривая на рисунке 2 фактически является экспозиционной характеристикой пленки Биохром. Эта характеристика позволила оценить чувствительность образца к записи на длине волны 532 нм, которая составляет $S = 2,8 \cdot 10^{-2}$ Дж/см². Погрешность определения величины S составила 20%. Полученное значение не намного отличается от приведенного в литературе [1].

Процесс восстановления исходной формы белка можно представить в виде суммы двух экспоненциальных составляющих. «Быстрая» компонента имеет характерное время жизни порядка 4 с, а «медленная» - 30 с.

Таким образом, время хранения информации, записанной на образце пленки Биохром, составляет 30-40 секунд, однако значительное снижение контрастности записи происходит в течение первых 10-ти секунд.

В работе показано, что основные характеристики образца регистрирующего материала на основе бактериального родопсина (пленка «Биохром») после продолжительного хранения в целом сохраняются. И такая «рекордная долговечность», втрое превышающая заявленный срок службы видимо не является предельной.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России, проект № FSGU-2023-0003.

Список литературы

- [1] Дружко А.Б. Бактериородопсин: фундаментальные аспекты и возможности для практического применения / А.Б. Дружко — М.: РАН, 2022. — 92с.
- [2] Всеволодов Н.Н. Биопигменты – фоторегистраторы: фотоматериал на бактериородопсине / Н.Н. Всеволодов — М.: Наука, 1988. — 224 с.
- [3] Лантух, Ю. Д. Фотохромные свойства пленки Биохром после 30-летней консервации // HOLOEXPO 2023: 20-я Международная конференция по голограммии и прикладным оптическим технологиям : Тезисы докладов. — СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2023. — С. 464–467.
- [4] Лантух, Ю. Д. Алиджанов Э.К., Раздобреев Д.А. Оптические свойства пленок на основе бактериородопсина // В сборнике: Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. 01–03 февраля 2024 года. Сборник материалов Всероссийской научно-методической конференции. Оренбург, с. 3470-3473.
- [5] Лантух, Ю. Д. Влияние температуры на фотохромные свойства пленок бактериородопсина // HOLOEXPO 2024: 21-я Международная конференция по голограммии и прикладным оптическим технологиям : Тезисы докладов. — Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2024. — С. 304–305.
- [6] Лантух, Ю. Д. Обратимая оптическая запись в фотохромном материале на основе бактериородопсина // В сборнике: Теория и практика инновационных исследований в области естественных наук. Сборник материалов конференции. Оренбург, 2024. С. 255-258.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ АНОМАЛЬНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ В ЗОЛЬНЫХ ОСТАТКАХ БАННЫХ ПЕЧЕЙ СПЕКТРАЛЬНЫМИ И ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Макаров В.Н.¹, канд. физ.-мат. наук, Серёгин М.М.^{2,3}, Юдин А.А.¹,
Узенбаев Ф.Г.¹, канд. физ.-мат. наук, доцент, Четверикова А.Г.¹,
д-р физ.-мат. наук, доцент

¹**ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет»,
г. Оренбург, Россия, makarsvet13@gmail.com**

²**Московский физико-технический институт, г. Москва, Россия**

³**Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
- Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова,
г. Гатчина, Россия**

Используя данные ИК-спектроскопии и химических методов анализа, идентифицированы зольные остатки банных печей: силикаты кальция, аморфный кварц, карбонаты, кутногорит; установлено наличие связи S-H. Твёрдые фазы образовались из-за наличия в дровяных объектах дисперсных полиминеральных запесоченных включений

Ключевые слова: зольный остаток, ИК-спектроскопия, силикат кальция, кутногорит.

Владельцы частной компании, эксплуатирующей бани на дровах, обратились с проблемой образования твердых включений в золе после сжигания древесины. Аномальные твердые образования, обнаруженные при очистке печей, требуют идентификации и объяснения их происхождения. Целью данного исследования является анализ состава и структуры данных образований, а также выявление возможных причин их возникновения, связанных, возможно, с условиями горения, качеством топлива или другими возможными факторами.

Твёрдые фазы представляли собой вытянутые стержни длиной от 5 до 15 см (рисунок 1) с формой, близкой к прямоугольному параллелепипеду. Такая форма, может объясняться как конструкцией банной печи, так и естественным габитусом самих кристаллов. Цвет образцов варьировался от бледно-серого до темно-серого с желтыми и коричневыми включениями. После помола и рассеивания исследуемых объектов, полученные порошковые пробы приобрели темно-жёлтый цвет и слабый, но характерный запах серы.

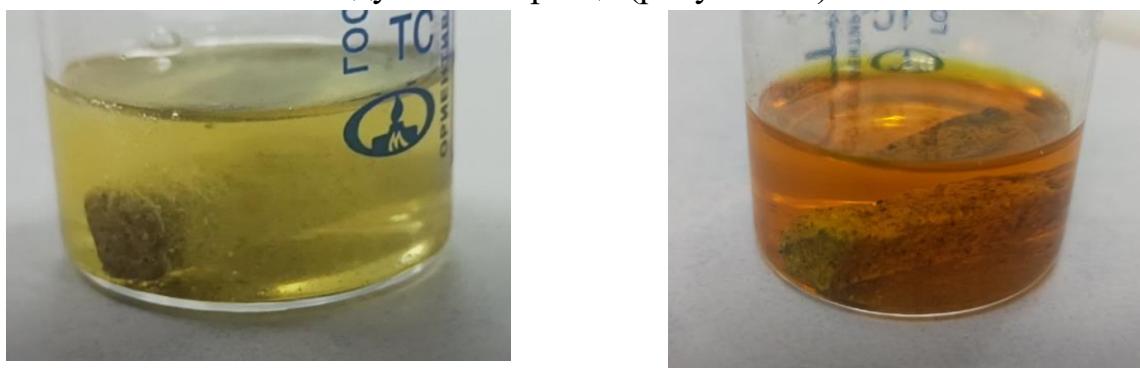
Для идентификации твердых образований были проведены ИК-

спектроскопические исследования, сопоставляемые с результатами аналитической химии.



Рисунок 1 – Типичный вид твердофазных образований в зольных остатках

Дополнительно проведён рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) некоторых химических элементов. Выполнены параллельные исследования трёх проб: исходных твердофазных образований, после воздействия в течение суток дистиллированной воды и соляной кислоты. При взаимодействии исследуемых объектов с водой наблюдали быструю стадию газообразования. После помещения образцов в соляную кислоту газообразование шло длительнее и более интенсивно (рисунок 2а). После суток, раствор соляной кислоты приобрел коричневый цвет, что указывает на включения ионов железа, вымываемых из исследуемого образца (рисунок 2б).



а

б

Рисунок 2 – Твердые образования в зольных остатках в соляной кислоте: в стадии газообразования (а) и после суток взаимодействия (б)

Согласно данным ИК-спектроскопии, основное поглощение наблюдалось в следующих диапазонах обратных длин волн, см^{-1} : 400 – 600, 700 – 1300, 1300 – 1700 и 3300 – 3600 (рисунок 3А).

Первая группа полос в области 400 – 600 (рисунок 3В) принадлежала деформационным колебаниям Si-O, учитывая, что в исходном образце массово присутствовала фаза $\beta\text{-CaSiO}_3$ [1]. При замачивании образца на 24 часа в дистиллированной воде происходило структурное превращение $\beta\text{-CaSiO}_3$ в насыщенный водой силикат $\gamma\text{-Ca}_2\text{SiO}_4$ [1]. Об этом говорит широкая полоса 3500 см^{-1} и полосы в районе 1600 см^{-1} (рисунок 3Д), соответствующие валентным и деформационным колебаниям связанной воды [2]. Подобные структурные превращения возможны из-за того, что высокотемпературная фаза

β -CaSiO₃ является метастабильной. Линии в области 500 – 600 см⁻¹ хорошо согласуются литературными данными [1] (рисунок 3В). Три полосы поглощения в районе 880 – 1000 см⁻¹ сдвинуты на 50 см⁻¹ в сторону больших волновых чисел, идеально воспроизведя структуру дегидратированного минерала. Сдвиг линий в этой области произошёл из-за наличия связей с водой, влияющих на вибрационные колебания Si-O связей [3]. Аналогичные связи с гидроксильными группами наблюдались и в образце после взаимодействия с HCl. Однако, несмотря на изменения в структуре колебаний связей Si-O, в исследуемом образце после обработки соляной кислотой не произошло полного перехода в стабильную фазу γ -Ca₂SiO₄, оставив характерную структуру β -CaSiO₃. На присутствие в твердофазных печеных образованиях силикатов также указывает результат качественной реакции с азотной кислотой. При взаимодействии размолотого порошкообразного образца с азотной кислотой наблюдался сначала интенсивный нагрев (вероятно, из-за реакции с ионами железа), а после – образование геля (ортокремниевой кислоты). Силикаты в зольных остатках баньных печей могли образоваться из-за наличия в дровяных печеных объектах дисперсных полиминеральных запесоченных включений. На ИК-спектре (рисунок 3В) обнаружены колебания, соответствующие аморфному SiO₂, что также подтверждает данную гипотезу [4, 5].

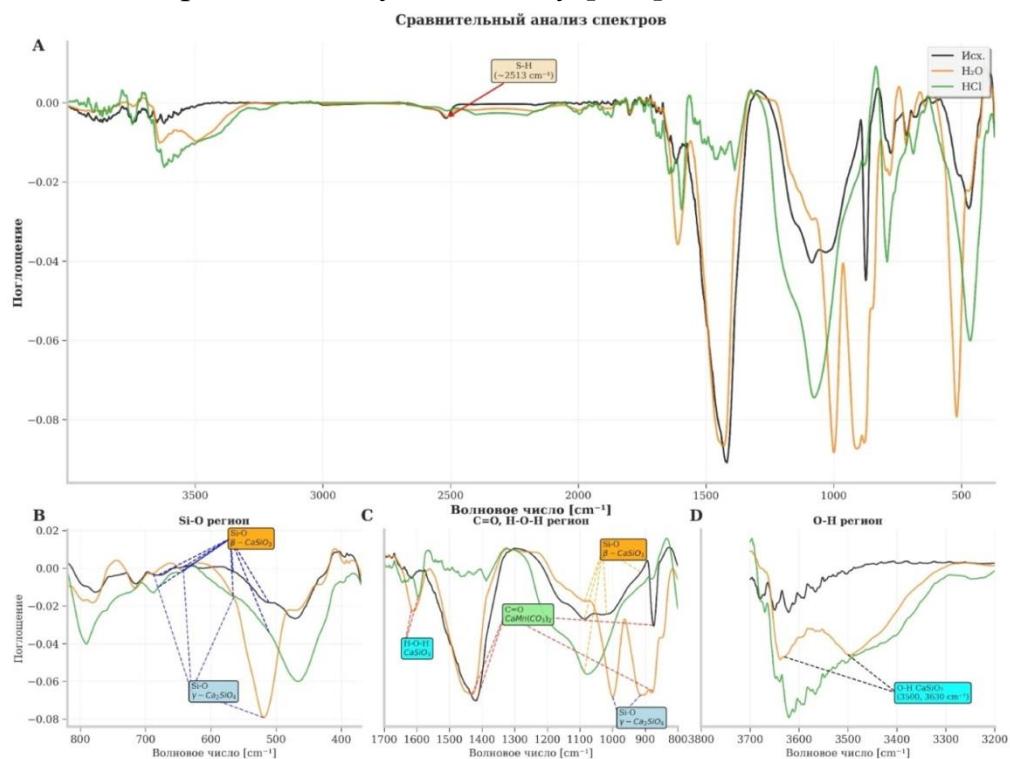


Рисунок 3- ИК-спектры твердофазных образований в зольных остатках, см⁻¹: обзорный спектр (А), в областях 400 – 800 (Б), 800 – 1700 (С) и 3200 – 3800 (Д)

Следующая характерная широкая полоса наблюдалась на 1427 см⁻¹, сопутствовавшая интенсивной узкой полосе на 876 см⁻¹ (рисунок 3С), они

принадлежали карбонатным минералам, что типично при ИК-исследовании зол древесины [6]. Это коррелирует с наличием эффекта газообразования при помещении образцов в воду и/или кислоту. Кроме того, различимы связи, принадлежавшие кутногориту [6] – минералу из группы доломитов. Линии этого минерала регистрировались и в водной пробе, но почти полностью исчезали после кислотной обработки, подтверждая карбонатную (доломитную) природу минерала. Кутногорит существует как в марганцевой ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$), так и в железной ($\text{CaFe}(\text{CO}_3)_2$) модификации, причём идентифицировать эти разновидности методами ИК-спектроскопии практически невозможно. Поэтому дополнительно был проведён РФА для идентификации в образце марганца и железа. Доля марганца в образце составила примерно от 0,1 до 0,2 %, а доля железа – несколько процентов, что объяснимо. Поэтому наиболее вероятно наличие в исследуемом образце железосодержащей разновидности кутногорита. Существование метастабильного и стабильного $\beta\text{-CaSiO}_3$, а также присутствие кутногорита, свидетельствует о неравномерных температурных полях в печи.

В области $2500 - 2519 \text{ см}^{-1}$ (рисунок 3А) во всех трёх пробах (исходной и после обработки дистиллированной водой и соляной кислотой) обнаружена полоса, соответствовавшая S-H колебаниям [7], которая смешалась в сторону уменьшения волнового числа от исходного состояния (наибольшее значение) до образца, обработанного кислотой (наименьшее значение), что говорило об ослаблении S-H связи. Дополнительно был проведен качественный анализ наличия в образце S-H связи, с помощью индикатора нитропруссия натрия [8]. В результате качественной реакции наблюдался красноватый оттенок раствора (рисунок 4). Такие связи зачастую обнаруживаются в зольных остатках при сжигании дров.

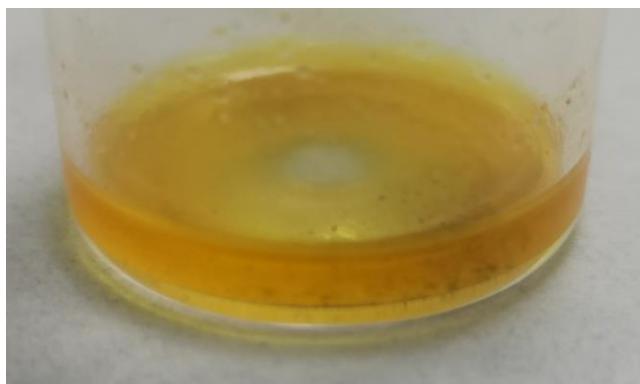


Рисунок 4 – Раствор нитропруссия натрия после идентификации S-H связи

Полос, принадлежащих наиболее типичным минералам и содержащих оксиды железа, не обнаружено. Косвенно, на наличие железа указывало то, что образцы способны притягиваться к неодимовым магнитам, а также ранее

описанные реакции с кислотами. Это можно объяснить наличием в ИК-спектре образце пиков, маскирующих связи железа. Для получения большей информации необходимо использовать рентгеноструктурный анализ и вейвлет-анализ спектров [9].

Таким образом, аномальные твёрдые образования были сформированы в печи из-за наличия на дровах засорения в виде песка (или земли), содержащие кремний в составе. Это привело к образованию силикатов кальция (разной степени стабильности) и аморфного SiO_2 – основа рассматриваемых твердых образований. Также в составе обнаружены карбонаты, кутногорит, связь S-H и соединения железа (по данным РФА, химических и магнитных тестов).

Список литературы

1. Eniu D. et al. FTIR and EPR spectroscopic investigation of calcium-silicate glasses with iron and dysprosium // Journal of Molecular Structure. – 2015. – Т. 1084. – Р. 23-27.
2. Gregson C. et al. Thermodynamic and kinetic controls on phase stability and incorporation of water in larnite (β - Ca_2SiO_4): Implications for calcium silicate inclusions in diamonds // Contributions to Mineralogy and Petrology. – 2024. – Т. 179. – №. 9. – Р. 82 (1-22).
3. Gou Z., Chang J., Zhai W. Preparation and characterization of novel bioactive dicalcium silicate ceramics // Journal of the European Ceramic Society. – 2005. – Т. 25. – №. 9. – Р. 1507-1514.
4. Tran T.N. et al. Synthesis of amorphous silica and sulfonic acid functionalized silica used as reinforced phase for polymer electrolyte membrane // Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology. – 2013. – Т. 4. – №. 4. – Р. 045007.
5. Серегин, М. М. ИК-спектроскопия, как метод регистрации структурных превращений полимерной глины / М. М. Серегин, В. Н. Макаров, А. Г. Четверикова // Химическая физика молекул и полифункциональных материалов: сборник материалов международной научной конференции, Оренбург, 28–30 ноября 2022 года, 2022. – С. 55-60. – EDN SZDRAY.
6. Makreski P., Jovanovski G. Minerals from Macedonia. IX. Distinction between some rhombohedral carbonates by FTIR spectroscopy. Bulletin of the Chemists and Technologists of Macedonia. – 2003. – Т. 22. – №1. – Р. 25-32.
7. Xia Z. et al. Heavy metal ion removal by thiol functionalized aluminum oxide hydroxide nanowhiskers // Applied Surface Science. – 2017. – Т. 416. – Р. 565-573.
8. Butler A. R., Glidewell C. Recent chemical studies of sodium nitroprusside relevant to its hypotensive action // Chemical Society Reviews. – 1987. – Т. 16. – Р. 361-380.

**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭКСИТОННОГО СЛОЯ
НА ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИСТЕМЫ
«МОЛЕКУЛА - МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ НАНОЧАСТИЦА С J-СЛОЕМ»**

**Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Аннотация: теоретически исследовано влияние оптических и геометрических характеристик сферической металлической наночастицы, покрытой экситонным слоем, на безызлучательные и радиационные спектры системы «молекула-слоистая наночастица». Обнаружено, что спектральные полосы скорости нерадиационного переноса энергии и спонтанного испускания уменьшаются по амплитуде и расщепляются на две частотные компоненты, расстояние между которыми увеличивается с ростом индукции магнитного поля.

Ключевые слова: *слоистая наночастица, J-агрегаты, перенос энергии, спонтанное испускание, магнитное поле*

Современные исследования в области нанофотоники сфокусированы на детальном понимании механизмов взаимодействия в гибридных плазмон-экситонных системах, где контроль над параметрами экситонного слоя является ключевым для управления оптическим откликом системы. Одним из наиболее перспективных классов таких гибридов являются наночастицы (НЧ) с плазмонным ядром (например, из золота или серебра) и экситонной оболочкой из J-агрегатов цианиновых красителей. Исследование таких структур, имеет фундаментальное и прикладное значение для создания новых оптических материалов, сенсоров и устройств.

В работе [1] приведены сведения о дипольных и мультипольных локализованных плазмон-поляритонах в металлических наночастицах и о молекулярных экситонах в упорядоченных J-агрегатах красителей, необходимые для понимания эффектов плекситонной связи и основных закономерностей в спектрах поглощения, рассеяния и люминесценции рассматриваемых наноструктур. Как показано в работе [2] по спектрам поглощения и рассеяния света наночастицами с биметаллическим ядром, правильно подобранная геометрия оболочки позволяет управлять положением и интенсивностью плазмонных резонансов, «настраивая» их для максимального

перекрытия с экситонным резонансом J-агрегата. Установлено, что в разнообразных металлоорганических системах проявляются такие эффекты, как плазмонно-усиленная флуоресценция J-агрегатов [3], фотоиндуцированные реакции разделения зарядов в J-агрегатах вблизи металлической поверхности или металлических частиц [4]. В работе [5] установлена зависимость скорости передачи энергии между монослоями молекул цианиновых красителей, образующих J-агрегаты, посредством поверхностных плазмонов металлической пленки нанометровой толщины, расположенной между монослоями от геометрических и электродинамических параметров системы.

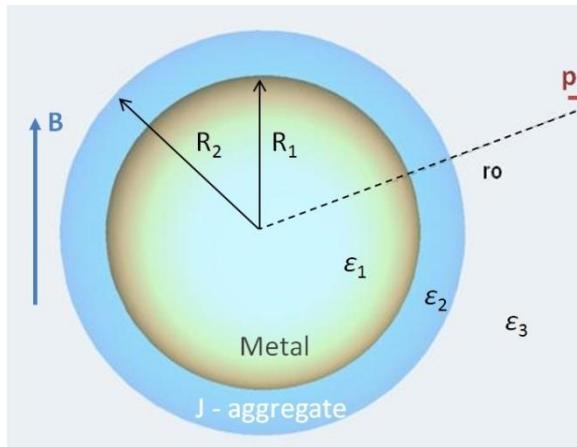


Рисунок 1 – Геометрическая конфигурация исследуемой системы

В данной работе проводится теоретическое исследование влияния оптических и геометрических параметров сферической металлической наночастицы с экситонным слоем на безызлучательные и радиационные спектры системы «молекуло-слоистая наночастица». Также проведено исследование влияния постоянного магнитного поля на указанную систему.

Исследуемая система схематически изображена на рисунке 1. Для тензора $\vec{\alpha}$ дипольной поляризуемости слоистого композита с анизотропной сердцевиной применяется следующее выражение [6]

$$\vec{\alpha}(\boldsymbol{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) = \left[(\boldsymbol{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) + 2\varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + (\boldsymbol{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_3)\xi^3 \right] \times \left[(\boldsymbol{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) + 2\varepsilon_2)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_3) + 2(\boldsymbol{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\xi^3 \right]^{-1} R_2^3, \quad (1)$$

где R_1 , R_2 – радиусы ядра НЧ и оболочки соответственно, $\xi = R_1/R_2$, $\boldsymbol{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B})$ – тензор диэлектрической проницаемости анизотропного металла, зависящий от вектора индукции \mathbf{B} постоянного магнитного поля, ε_3 – скалярная диэлектрическая проницаемость среды, окружающей двухчастичную систему, ε_2 – диэлектрическая проницаемость молекулярно-кристаллического (экситонного) слоя, определяемая выражением [6]

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_0 - f^2 / \left[(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{\text{exc}}^2 \right]. \quad (2)$$

Здесь, f – сила осциллятора, характеризующая связь фотонов с экситонами, Γ – величина, характеризующая релаксацию экситонных возбужденных состояний, обусловленную их взаимодействием с диссипативной системой фононов (ширина контура), ω_{exc} – перенормированная вследствие взаимодействия с фононами частота экситонов, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость, обусловленная всеми другими электронными состояниями кроме экситонного, определяющая величину ω_{exc}^2 .

Скорость безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения от молекулы к слоистой НЧ отождествляется со скоростью диссипации энергии поля от точечного дипольного источника в объеме НЧ, и может быть записана в виде [7]

$$U(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}) = \frac{1}{2\hbar} \text{Im} \left[\mathbf{p} \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \tilde{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \mathbf{p} \right]. \quad (3)$$

Здесь, \mathbf{p} – вектор дипольного момента перехода молекулы, $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) = r_0^{-3} (3\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \tilde{\mathbf{I}})$ – квазистатическая диадическая функция Грина точечного дипольного источника, $\tilde{\mathbf{I}}$ – единичная диада. Тензор $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0)$ задает определенную радиально-угловую конфигурацию двухчастичной системы, r_0 – расстояние между молекулой и слоистой НЧ.

Выражение для скорости w_{sp} спонтанного свечения молекулы, расположенной вблизи наночастицы на расстоянии r_0 от ее центра, при наличии внешнего магнитного поля принимает следующий вид [7]

$$w_{sp}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left[\tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \tilde{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \right] \mathbf{p}^2. \quad (4)$$

С использованием выражений (1)-(4) были рассчитаны спектры скорости переноса энергии U и спонтанного испускания w_{sp} .

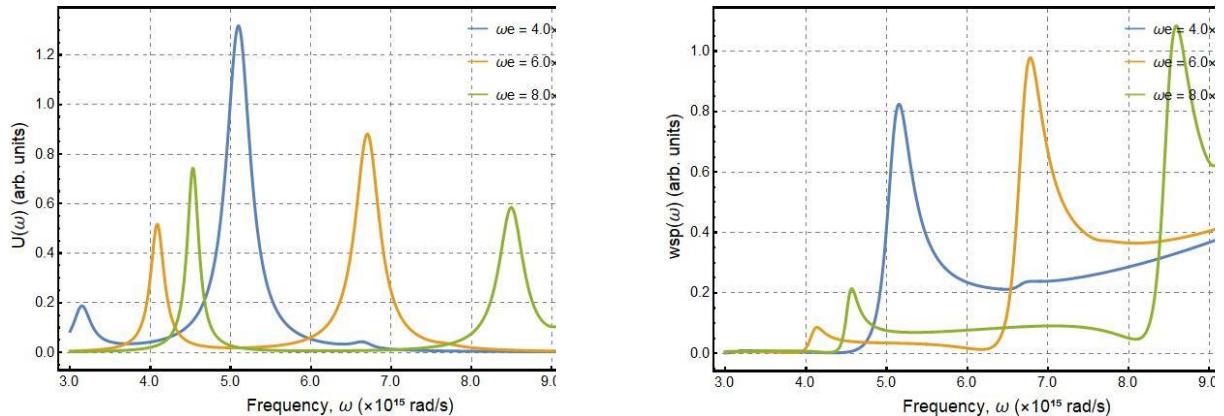


Рисунок 2 - Зависимость спектров U и w_{sp} от частоты ω_{exc} экситонов.

$R_1 = 10$ нм, $R_2 = 20$ нм, $r_0 = R_2 + 3$ нм, $\omega_p = 13.87 * 10^{15}$ с⁻¹, $\gamma = 1.6 * 10^{14}$ с⁻¹, $B = 0$ Тл

График скорости переноса U имеет три спектральных пика, которые смещаются в высокочастотную область спектра при увеличении частоты ω_{exc} экситонов (рис. 2). Аналогичные изменения спектров наблюдаются и для скорости испускания w_{sp} .

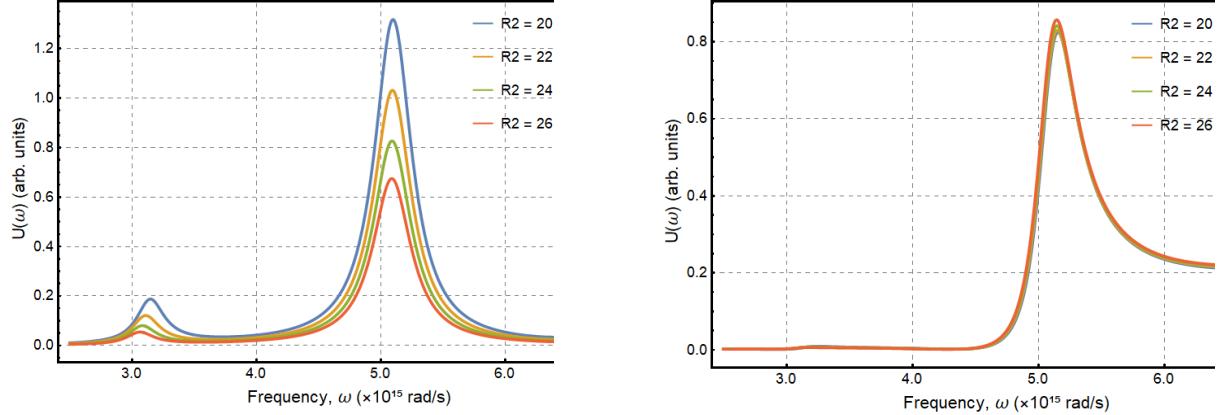


Рисунок 3 - Зависимости спектров U и w_{sp} от радиуса R_2 оболочки $R_1 = 10$ нм, $r_0 = R_2 + 3$ нм, $\omega_p = 13.87 \times 10^{15}$ с⁻¹, $\gamma = 1.6 \times 10^{14}$ с⁻¹, $B=0$ Тл

При увеличении радиуса экситонного слоя композитной НЧ с 20 до 26 нм (при этом радиус ядра НЧ оставался неизменным) спектр скорости безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения от молекулы к слоистой НЧ уменьшается на всех трех резонансных частотах, как показано на рисунке 3. Однако для скорости спонтанного испускания изменение толщины оболочки практически не оказывает влияния на спектры.

На спектре скорости переноса энергии наблюдаются три спектральных максимума (рис. 4). Первый пик – низкочастотный – всегда магниточувствительный. Второй пик не подвержен влиянию магнитного поля, что выражается в отсутствии расщепления. Третий пик также проявляет магниточувствительность, однако для его расщепления требуется более высокое значение индукции магнитного поля по сравнению с первым пиком.

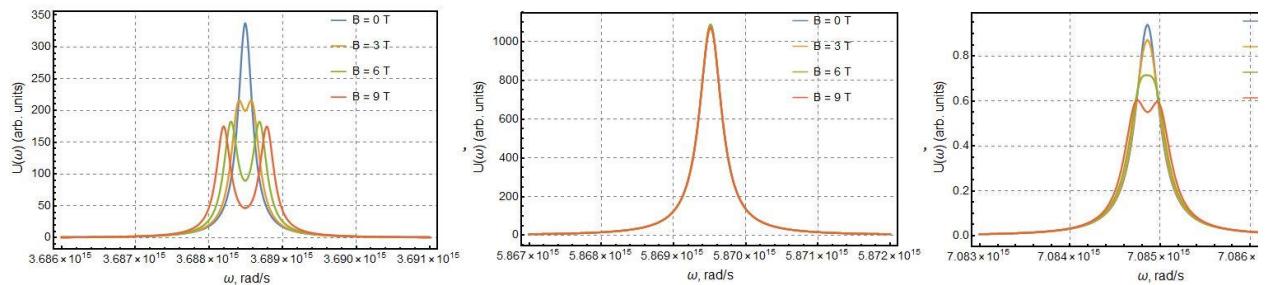


Рисунок 4 - Зависимость спектра скорости переноса от величины индукции магнитного поля

$$R_1 = 10 \text{ нм}, R_2 = 20 \text{ нм}, r_0 = R_2 + 3 \text{ нм}, \omega_p = 13.87 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}, \gamma = 1.6 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$$

При аномально высоких значениях магнитного поля ($B > 20$ Тл) наблюдается также трансформация центрального пика. Таким образом, подбор

определенных констант позволяет добиться расщепления всех спектральных линий. Есть предположение о природе каждой из спектральных полос: левая полоса – плазмонная, центральная – экситонная, правая – экситон-плазмонная.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2023-0003, гранта на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технического развития 075-15-2024-550.

Список литературы

- 1 Лебедев В. С., Кондорский А. Д. Оптика плазмон-экситонных наноструктур: теоретические модели и физические явления в системах металл/J-агрегат // Успехи физических наук. – 2025. – Т. 195. – №. 1. – С. 50.
- 2 Моритака С. С., Мекшун А. В., Лебедев В. С. Спектры поглощения и рассеяния света наночастицами с биметаллическим ядром Au/Ag и внешней оболочкой с двумя J-полосами молекулярных агрегатов // Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева Российской Академии Наук. – 2024. – Т. 51. – №. 12. – С. 63-72.
- 3 Sorokin A. V. et al. // J. Phys. Chem. C. – 2015. – Т. 119. – С. 2743-2751.
- 4 Hranisavljevic J. et al. Photoinduced charge separation reactions of J-aggregates coated on silver nanoparticles // Journal of the American Chemical Society. – 2002. – V. 124. – N 17. – P. 4536-4537.
- 5 Чмерева Т. М., Кучеренко М. Г. Безызлучательный перенос энергии экситонного возбуждения между монослоями J-агрегатов // Известия высших учебных заведений. Физика. 2018. – Т. 61. – № 2. – С. 91-97.
- 6 Кучеренко М. Г., Налбандян В. М. Спектры поляризуемостей замагниченных слоистых нанокомпозитов с анизотропной сердцевиной или оболочкой и локализованными поверхностными плазмонами // Оптический журнал. – 2018. – Т. 85. – №. 9. – С. 3-11.
- 7 Кучеренко М. Г., Налбандян В. М. Влияние сфероидальных замагниченных наночастиц на люминесценцию квантовых точек // Журнал прикладной спектроскопии. – 2024. – Т. 91. – №. 1.

ПОДГОТОВКА ИНЖЕНЕРНЫХ КАДРОВ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭКСПЛУАТАЦИОННОЙ НАДЕЖНОСТИ ЛИНЕЙНЫХ УСКОРИТЕЛЕЙ В УСЛОВИЯХ СТАЦИОНАРНОГО И МОБИЛЬНОГО ТЕХНИЧЕСКОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ

Нефедов А.О.¹, Кучаев В.Р.², Бакаев А.А.³

¹АО «Медицина», г. Химки, ²ООО «ПРК-Гамма», г. Москва,

³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет

Аннотация: в статье рассматриваются особенности подготовки инженерных кадров для сферы медицинской техники на примере кафедры медико-биологической техники Оренбургского государственного университета. Анализируется комплексный подход к формированию профессиональных компетенций, необходимых для работы с высокотехнологичным оборудованием. Центральным элементом исследования является сравнительный анализ двух моделей профессиональной реализации выпускников: штатного инженера в крупном медицинском центре и сервисного инженера в частной организации. Выявлены и систематизированы ключевые различия в функциональных обязанностях, условиях труда, требуемых навыках и зонах ответственности. Делается вывод об эффективности образовательной модели кафедры, основанной на интеграции глубоких фундаментальных знаний и прикладных навыков, что позволяет выпускникам адаптироваться к различным профессиональным средам.

Ключевые слова: медицинская техника, профессиональные компетенции, лучевая терапия, техническое обслуживание, ремонт.

Современная радиология, и в частности лучевая терапия, характеризуется высокой технологичностью и зависимостью от бесперебойной и точной работы сложного оборудования. Медицинские линейные ускорители являются критически важными аппаратно-техническими комплексами, отказ которых напрямую влияет на качество и доступность медицинской помощи. Поддержание их эксплуатационной готовности требует от инженерного персонала уникального набора компетенций, находящихся на стыке техники, физики и медицины. В данной связи подготовка высококвалифицированных кадров, способных решать столь комплексные задачи, приобретает стратегическое значение [3]. Профильная кафедра медико-биологической техники Оренбургского государственного университета выступает ключевым

элементом региональной и национальной системы подготовки таких специалистов [2]. Целью настоящей статьи является анализ образовательной модели кафедры и последующий сравнительный анализ двух основных карьерных траекторий её выпускников: работы в качестве штатного инженера в крупном государственном медицинском центре и в роли выездного сервисного специалиста в частной сервисной организации.

Учебные планы и образовательная программы кафедры медико-биологической техники сконструированы с учетом парадигмы компетентностного подхода и нацелены на формирование у студентов системы взаимосвязанных компетенций [1].

1. Фундаментальный блок. Основу подготовки составляет синтез глубоких знаний в области инженерных («Теоретические основы электротехники», «Электроника и микропроцессорная техника», «Схемотехника», «Медицинские приборы, аппараты, системы и комплексы», «Технические методы диагностических исследований и лечебных воздействий» и др.), медико-биологических («Связь живой материи с биоматериалами», «Методы медико-биологических исследований», «Медико-биологические системы сохранения здоровья» и др.) и физико-математических («Физика», «Основы взаимодействия физических полей с биологическими объектами» и др.) дисциплин. Это позволяет сформировать у будущего инженера навыки технического обслуживания в соответствии с действующими регламентами и понимание физико-технической сущности процессов дозиметрии, формирования пучка и их непосредственной связи с биологическим эффектом и клиническими протоколами лечения.

2. Практико-ориентированный блок. Неотъемлемым элементом формирования профессиональных компетенций является система практик, интегрированная в учебный процесс. Студенты кафедры проходят производственную и научно-исследовательскую практику на базе организаций-партнеров, выступающих основными работодателями в регионе и за его пределами. Данное сотрудничество представляет собой эффективную модель двустороннего взаимодействия: предприятия получают возможность оценить и подготовить потенциального сотрудника в условиях реального производства, а студент – применить полученные знания для решения актуальных задач и сформировать четкое понимание будущей профессиональной деятельности. Важным индикатором успешности данной модели является высокая доля выпускников, получающих приглашение к трудуоустройству от предприятия-партнера уже на этапе прохождения практики.

Выпускники кафедры, работая с одним типом оборудования, реализуют свой профессиональный потенциал в двух принципиально разных моделях.

Таблица 1 – Сравнительная характеристика профессиональных ролей

Критерий	Штатный инженер	Выездной сервисный инженер
Масштаб и тип оборудования	Работа с парком конкретного медицинского учреждения	Обслуживание широкого парка оборудования
Характер задач	Ежедневный контроль за техническим состоянием оборудования, помочь медицинскому персоналу в разрешении вопросов функционирования действующего оборудования	Оперативное устранение сложных отказов, плановое ТО по контрактам, монтаж, демонтаж и ввод в эксплуатацию
Уровень технического вмешательства	Чаще – замена модулей, оперативная диагностика до уровня платы. Сложный ремонт может требовать вызова специалистов производителя	Глубокая диагностика и ремонт до компонентного уровня
Социально-коммуникативный контекст	Работа в постоянном коллективе, интеграция в клиническую среду, понимание специфики конкретного учреждения	Работа выездного характера, взаимодействие с разными коллективами, высокая автономность
Зона ответственности	Обеспечение бесперебойной работы конкретного аппарата в рамках лечебного процесса медицинского учреждения	Выполнение условий действующих контрактов, минимизация времени простоя оборудования у заказчика, поддержание репутации компании

Проведенный анализ демонстрирует, что образовательная модель кафедры медико-биологической техники ОГУ является эффективной и гибкой. Она направлена на формирование не узкого исполнителя, а специалиста с развитым системным мышлением, способного адаптироваться к различным профессиональным средам. Фундаментальная подготовка позволяет выпускнику понимать принципы работы любой модели и типа медицинской

техники, а не просто следовать инструкции. Таким образом, кафедра успешно решает стратегическую задачу подготовки высококвалифицированных кадров, способных вносить непосредственный вклад в повышение технологического суверенитета и доступности высокотехнологичной медицинской помощи в стране, независимо от выбранной модели профессиональной реализации.

Список литературы

1. Бакаев, А. А. Актуальность формирования и содержание исследовательской культуры будущего инженера / А. А. Бакаев // Primo Aspectu. – 2024. – № 3(59). – С. 34-38. – DOI 10.35211/2500-2635-2024-3-59-34-38.
2. НИРС как средство реализации компетенций на примере бакалавриата профиля ИДМБ / А. Д. Стрекаловская, О. Н. Каныгина, Н. С. Ретенер [и др.] // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Материалы Всероссийской научно-методической конференции (с международным участием), Оренбург, 04–06 февраля 2015 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2015. – С. 1112-1116.
3. О важности подготовки инженеров, работающих с медицинским оборудованием, в настоящее время / Д. В. Судаков, О. В. Судаков, Г. В. Сыч [и др.] // Инженерное образование в условиях цифровизации общества и экономики : Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, Волгоград, 16 октября 2023 года. – Чебоксары: Издательский дом "Среда", 2023. – С. 48-54. – DOI 10.31483/r-108619.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ζ -ПОТЕНЦИАЛА И РАЗМЕРА НАНОЧАСТИЦ Ag@ХИТОЗАН В ЗАВИСИМОСТИ ОТ pH МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Неясов П.П., Алимбеков И.Р.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Аннотация: в данной работе анализируются изменения ζ -потенциала и размера наночастиц Ag, Ag@хитозан возникающих в результате процесса адсорбции хитозана на отрицательно заряженные частицы Ag. Представлен метод синтеза системы Ag@хитозан. Получены графики распределения по размерам для наночастиц серебра и частиц Ag@хитозан, а также кривые ζ -потенциала для различных значений pH среды.

Ключевые слова: наночастицы серебра, хитозан, динамическое рассеяние света, ζ -потенциал.

Введение

Серебряные наночастицы известны своим антимикробным действием. В то же время матрица хитозана может служить биосовместимым носителем для данных частиц. Авторы [1] сообщают, что наночастицы Ag@хитозан с наноразмерной поверхностной структурой обладают потенциалом в качестве антимикробных биоматериалов и противоинфекционных раневых покрытий.

Также хитозан может служить каркасом для синтезированных частиц, так, авторам [2] удалось разработать многофункциональный сополимерный каркас, основанный на хитозане, поливиниловом спирте и наночастицах серебра для транспортировки ибупрофена как нерастворимого в воде обезболивающего средства. Хитозан может служить эффективным агентом для доставки лекарств. В работе [3] были получены и оценены микросфера хитозана, сшитые эпихлоргидрином, на предмет адсорбции Ag⁺ и образования наночастиц серебра. Полученный гибридный материал использовался для антибактериальной активности и контролируемого высвобождения ибупрофена. Микросфера с ионами серебра продемонстрировали активность против *E. coli* и *S. aureus*. Концентрация ибупрофена, включённого в хитозановые микросферы, составила $7,9 \times 10^{-3}$ моль/л, а в микросферах с AgNP — $1,8 \times 10^{-2}$ моль/л. Микросфера с частицами Ag высвобождали больше препарата (77%), чем материал без частиц Ag.

Существует необходимость в разработке высокочувствительных плазмонных сенсоров, которые обеспечивают хорошую биосовместимость и оптическую стабильность для обнаружения низких уровней анализаторов в биологических средах. В исследовании [4] авторы сообщают об образовании покрытых хитозаном серебряных наночастиц треугольной формы в растворе путем синергетического действия хитозана и тринатрийцитрата в присутствии затравок серебра и аскорбиновой кислоты. Было обнаружено, что эти анизотропные серебряные наночастицы, заключенные в биополимерные оболочки, особенно стабильны и могут быть успешно использованы в качестве универсальных плазмонных субстратов для молекулярного зондирования в растворе.

Хитозан может найти применение и в создании сенсоров, так, например, количественное обнаружение пероксида водорода (H_2O_2) осуществляется с помощью оптического датчика, работающего на основе поверхностного плазмонного резонанса (ППР) наночастиц Ag и Au, встроенных в хитозан [5]. Наночастицы Ag и Au, были включены в матрицу хитозана методом литья из раствора. Наблюдалось значительное различие в положении и интенсивности полосы поглощения ППР в зависимости от концентрации H_2O_2 . Предел обнаружения этих оптических сенсоров составил до 0,3 мкМ концентрации H_2O_2 .

За счет возможности контроля зарядовыми свойствами молекул, хитозан может найти применение в управлении спин селективными реакциями. Так в работе [6] авторы предлагают теоретическую модель кинетики кроссаннигиляции электронно-возбужденных триплетных органических молекул и молекул синглетного кислорода во внешнем магнитном поле, учитывая спиновую селективность реакции O_2 -тушения Т-центров, их локализацию в рыхлой полимерной структуре, а также неоднородное распределение звеньев полимерной цепи, адсорбированной наночастицей. Получена функция формы импульса кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции, инициированной молекулярным кислородом в области между звеньями макромолекулы, адсорбированной на поверхности диамагнитной наноглобулы.

Эффективным методом изменения молекулярной конформации хитозана является наложение внешнего электрического поля. В работе [7] методом броуновской динамики проведено моделирование конформаций заряженной и незаряженной молекулы хитозана адсорбированной на металлической наночастице с наложенным внешним электрическим полем в приближении идеальной гауссовой цепи, показано различие в структуре заряженной и

незаряженной

форм

молекулы

хитозана.

Метод синтеза

Синтез наночастиц серебра покрытых оболочкой хитозана производили по описанной ниже методике.

Для получения наночастиц серебра (Ag nps) использовался цитратный метод [8]. Для этого растворяли 4.2 мг нитрата серебра (AgNO_3) в 25 мл дистиллированной воды, а затем данный раствор доводили до кипения при перемешивании магнитной мешалкой (1000 об/мин). Далее растворяли 35.7 мг цитрата натрия ($\text{Na}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7 \cdot 5.5\text{H}_2\text{O}$) в 100 мл дистиллированной воды и при непрерывном перемешивании раствора нитрата серебра, по каплям добавляли раствор цитрата натрия. После чего полученный раствор повторно был доведен до кипения и нагревался в течение 15 минут до приобретения жёлтого цвета. Далее раствор медленно охлаждался до комнатной температуры.

Раствор хитозана ($(\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_8\text{N}_2)_n$) готовился с концентрацией 1 мг на 10 мл дистиллированной воды с добавлением уксусной кислоты ($\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$) так, что pH раствора поддерживался на уровне ~ 4.5 [9].

Исходные растворы Ag наночастиц и хитозана смешивали в соотношении 1:1 в объеме 20 мл при перемешивании на 800 об/мин.

Результаты исследования

Размеры полученных частиц Ag исследовали на анализаторе размеров частиц Zetasizer Ultra Blue методом динамического рассеяния света. В результате диаметр не модифицированных частиц Ag составил 84 нм (рис. 1 α). ζ -потенциал анализировался на том же оборудовании и для Ag частиц в нейтральной среде составил ~ -48 мВ (рис. 1 β). Тогда как хитозан при pH=7.3 почти не заряжен ~ 2 мВ (рис. 1 β). Изоэлектрическая точка для хитозана лежит в пределах pH ≈ 8 , тогда как для частиц Ag – pH <2 и в общем недостижима (без модификации поверхности) из-за растворимости частиц в такой кислой среде.

Смешивание раствора Ag наночастиц и кислого раствора хитозана (pH=4.5) привело к смещению пика распределения по размерам от 84 нм до 598 нм, а ζ -потенциала от -48 до 18 мВ. Таким образом происходит изменение размеров и поверхностных зарядов анализируемых частиц в растворе за счет адсорбции положительно заряженных молекул хитозана на отрицательно заряженные серебряные наночастицы.

Уменьшение pH от 4.6 до 2 раствора частиц Ag@хитозан приводит к увеличению протонированности цепи хитозана и соответственно повышению степени его растворимости, и усилию сорбционного потенциала. При этом изменение размеров происходит от 598 до 340 нм, а ζ -потенциала от 18 до 41

мВ. Таким образом при повышении кислотности раствора возможно протекание одновременно двух процессов: происходит уплотнение полимерного слоя на частицах Ag и частичное экранирование наночастиц Ag ионами H^+ . В такой кислой среде особенно хорошо проявляется защитная функция хитозанового покрытия: если при $pH=2$ наночастицы серебра активно растворяются, что проявляется в потере цвета раствора и его опалесценции, то для частиц Ag@хитозан этого не происходит.

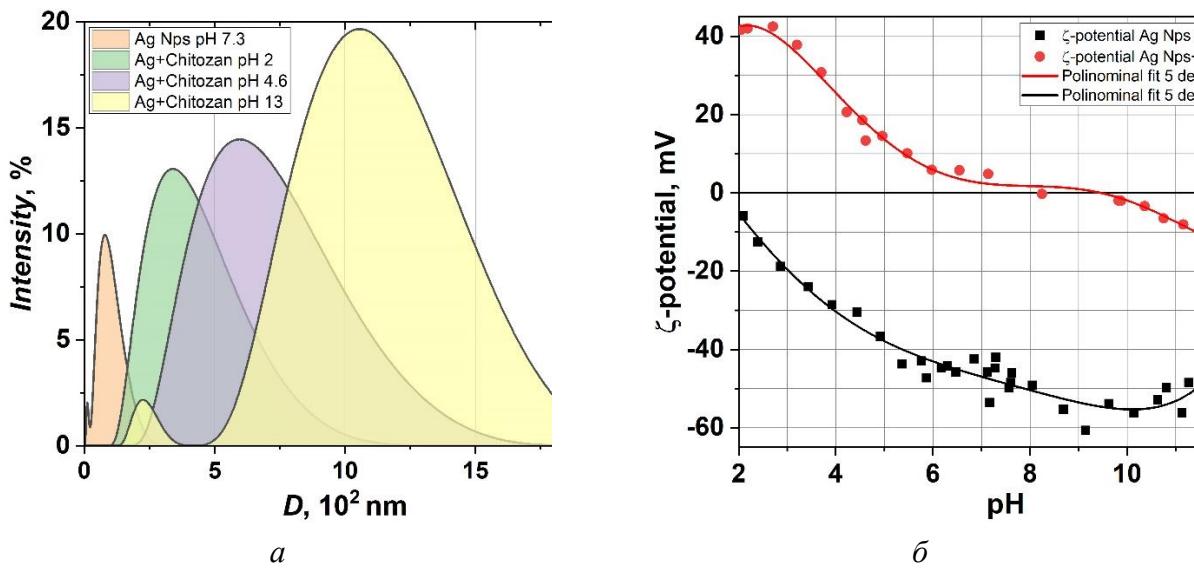


Рисунок 1 – Графики зависимости дзета-потенциала Ag наночастиц и Ag наночастиц покрытых хитозаном от pH (а). Графики распределения по размерам Ag частиц и частиц Ag@хитозан (б)

В нейтральной и щелочной среде резко снижается степень растворимости и протонируемости хитозана. Так при увеличении pH от 4.6 до 12.5 раствора частиц Ag@хитозан ζ -потенциал изменяется от 18 до -35 мВ, а диаметр от 598 до 1056 нм. Поверхностный заряд наночастиц Ag в сильнощелочной среде изменяется не сильно, только при $pH>12$ происходит заметное изменение (от -48 до -35 мВ). Частицы Ag@хитозан являются в данном случае центрами кристаллизации свободного хитозана в растворе, что и приводит к увеличению их размера.

Выводы

Таким образом анализ изменений размеров и ζ -потенциала не модифицированных и модифицированных хитозаном Ag наночастиц приводит к выводу о успешности использования хитозана как поверхностного модификатора и стабилизатора, выполняющего защитные функции, отрицательно заряженных частиц.

Список литературы

1. Masayuki Ishihara et al. Adsorption of Silver Nanoparticles onto Different Surface Structures of Chitin/Chitosan and Correlations with Antimicrobial Activities // Int. J. Mol. Sci. – 2015. – V. 16. – I.6. – P. 13973-13988.
2. Ensieh Ghasemian Lemraski et al. Ibuprofen@silver loaded on poly(vinyl alcohol)/chitosan co-polymer scaffold as a novel drug delivery system // Materials Today Communications. – 2022. – V. 33. – I. 104311. – P. 1–12.
3. Anna Karla dos S. Pereira et al. Antibacterial effects and ibuprofen release potential using chitosan microspheres loaded with silver nanoparticles // Carbohydrate Research. – 2020. – V.488. – I. 107891. – P. 1–7.
4. Monica Potara et al. Solution-phase, dual LSPR-SERS plasmonic sensors of high sensitivity and stability based on chitosan-coated anisotropic silver nanoparticles // J. Mater. Chem. – 2011. –V. 21. – P. 3625-3633.
5. Chitosan embedded with Ag/Au nanoparticles: investigation of their structural, optical and sensing properties // J. Polym. Res. – 2020. – V. 27. – I. 253.
6. Кучеренко, М. Г. Сенсибилизированная спин-селективная активация молекул синглетного кислорода вnanoструктурах адсорбированных макроцепей на поверхности сферической наночастицы / М. Г. Кучеренко, П. П. Нясов // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : сб. материалов Всерос. науч.-метод. конф., Оренбург, 1-3 февр. 2024 г. / Оренбург. гос. ун-т ; ред. А. В. Зайцев. - Оренбург: ОГУ,2024. – С. 3444-3452.
7. Нясов, П. П. Моделирование конформаций хитозана, адсорбированного на металлической наночастице во внешнем электрическом поле: метод броуновской динамики и приближение идеальной гауссовой цепи / П. П. Нясов, М. Г. Кучеренко // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : сб. материалов Всерос. науч.-метод. конф., Оренбург, 1-3 февр. 2024 г. / Оренбург. гос. ун-т ; ред. А. В. Зайцев. - Оренбург: ОГУ,2024. – С. 3491-3499.
8. Е.Д. Мишина, Н.Э. Шерстюк, Евдокимова А.А. Методы получения и исследования наноматериалов и наноструктур. Лабораторный практикум по нанотехнологиям. 2021. ISBN: 978-5-9963-0617-6.
9. Наумов В.С. Растворение и диффузия хитозана в водной среде и его координация с инсулином. Молекулярно-динамическое исследование Специальность 02.00.04 Физическая химия, диссертация на соискание ученой степени кандидата химических. Нижний Новгород – 2019.

ПРИМЕНЕНИЕ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕАКЦИИ ТРИПЛЕТ-ТРИПЛЕТНОЙ АННИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ МОЛЕКУЛ

Неясов П.П.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Аннотация: в данной работе приведена теоретическая модель триплет-триплетной аннигиляции электронно-возбужденных молекул в нанореакторе, содержащем ферромагнитную частицу, и расчеты, выполненные по ней с применением броуновской динамики. Показаны различия в эффектах магнитного поля реакции в однородном и неоднородном магнитном поле.

Ключевые слова: *триплет-триплетная аннигиляция, наночастица, нанореактор, неоднородное поле, магнитный эффект.*

Триплет-триплетная аннигиляция (ТТА) играет важную роль в фотонике и органической электронике [1]. Изучение ее в условиях неоднородных магнитных полей ферромагнитных наночастиц актуально, так как позволяет управлять реакционной динамикой молекул [2].

В данной работе предпринята попытка моделирования процесса триплет-триплетной аннигиляции (ТТА) при помощи использования броуновской динамики в диффузионной части задачи. Объектом исследования выступает спин-коррелированная пара, состоящая из первой (1) и второй (2) триплетных (Т-) молекул, свободно диффундирующих (с коэффициентами диффузии $D_{1(2)}$) в нанополости (нанореакторе) радиуса R_{re} , содержащей ферромагнитную частицу радиуса R_{np} , создающую вокруг неоднородное анизотропное магнитное поле индукцией \mathbf{B}_{np} . Также наложено внешнее магнитное поле \mathbf{B}_0 .

Спин-гамильтониан Т-Т-пары $\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ имеет вид:

$$H = g_1 \mu_B B(\mathbf{r}_1) S_{Z_1} + g_2 \mu_B B(\mathbf{r}_2) S_{Z_2} - 2J_{exc}(l) \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_1 \mathbf{D}(\Omega_1) \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 \mathbf{D}(\Omega_2) \mathbf{S}_2.$$

Первые два слагаемых $g_{1(2)} \mu_B B(\mathbf{r}_{1(2)}) S_{Z_{1(2)}}$ определяют зеемановское взаимодействие одиночных триплетов, третье – межмолекулярное обменное взаимодействие с обменным интегралом $J_{exc}(l)$, а два последних $\mathbf{S}_{1(2)} \mathbf{D}(\Omega_{1(2)}) \mathbf{S}_{1(2)}$ – внутритриплетное спин-спиновое взаимодействие.

Спиновая динамика парного синглетного состояния определялась оператором $\hat{\rho}_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \exp[-K_{-1}t] \exp(\hat{K}t) \hat{\rho}_s(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, 0) \exp(\hat{K}^*t)$, где \hat{K} , \hat{K}^* - неэрмитовы эволюционные операторы, K_{-1} - скорость распада когерентной Т-Т-пары.

Суммарное магнитное поле \mathbf{B} складывалось из магнитного поля \mathbf{B}_{np} ферромагнитной наночастицы и внешнего магнитного поля \mathbf{B}_0 :

$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_{np} = \mu_2 \mathbf{H}_0 + \mu_2 \left(\frac{3\mathbf{r}(\mathbf{mr})}{r^5} - \frac{\mathbf{m}}{r^3} \right)$, где \mathbf{B}_0 , \mathbf{H}_0 - индукция и напряженность внешнего однородного изотропного магнитного поля, μ_1 - магнитная проницаемость материала наночастицы, μ_2 - магнитная проницаемость нанореактора, $\mathbf{m}(\mathbf{B}_0)$ - магнитный момент наночастицы.

Броуновское движение моделировалось исходя из хорошо известного уравнения диффузии Фоккера-Планка $\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}$, где $p(x, t)$ - вероятность найти частицу в точке x в момент времени t . Его решение выглядит в виде $p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$. Исходя из этого, каждое последующее положение $\{x_{i+1}, y_{i+1}, z_{i+1}\}_{1(2)}$ Т-молекул (1), (2) определялось псевдослучайной генерацией (метод Монте-Карло) переменной из нормального распределения независимо для всех трех координат:

$$\{x_{i+1}, y_{i+1}, z_{i+1}\}_{1(2)} = \begin{cases} x_i + \text{RandomVariate} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\sigma} \right)^2} \right] \\ y_i + \text{RandomVariate} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma} \right)^2} \right], \\ z_i + \text{RandomVariate} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{z}{\sigma} \right)^2} \right] \end{cases}$$

где $\sigma_{1(2)} = \sqrt{2D_{1(2)}\tau}$ - стандартное отклонение для смещения Т-молекул (1), (2), $D_{1(2)}$ - коэффициент диффузии молекул (1), (2), $\tau = \frac{t}{N}$ - шаг времени наблюдения, t - полное время наблюдения, N - количество шагов, $\{x_1, y_1, z_1\}_{1(2)}$ - задаваемые начальные координаты Т-молекул. При этом каждые последующие координаты генерировались только, если удовлетворяли условию: $R_{np} \leq \sqrt{x_{i+1}^2 + y_{i+1}^2 + z_{i+1}^2} \leq R_{re}$. Для приведенных здесь расчетов $\tau = 1$ нс, $N = 100$.

$$\text{Средняя объемная плотность вероятности } \langle PDF \rangle_{1(2)} = \frac{1}{N_{ex}NV} \sum_{j=1}^{N_{ex}} n_{V_{1(2)}}(\mathbf{r}_{1(2)}),$$

где $n_{V_{1(2)}}(\mathbf{r}_{1(2)})$ - локальное число местоположений Т-молекул (1), (2) в единичном объеме V , N_{ex} - число экспериментов (в данных расчетах равно 100).

Средняя неселективная по спину скорость $\langle \chi(t) \rangle$ дистанционной аннигиляции в момент времени $t = i\tau$ ($i = 1, \dots, N$) имеет вид

$$\langle \chi(t) \rangle = \frac{U_0}{N_{ex}} \sum_{j=1}^{N_{ex}} e^{-\frac{2\sqrt{\left(x_{2ij} - x_{1ij}\right)^2 + \left(y_{2ij} - y_{1ij}\right)^2 + \left(z_{2ij} - z_{1ij}\right)^2} - l_0}{L}}, \text{ где } U_0 \text{ - скорость элементарного акта аннигиляции, } l_0 \text{ - максимальный радиус сближения Т-молекул, } L \text{ - характерный масштаб перекрытия электронных оболочек.}$$

Константа средней скорости аннигиляции:

$$\langle K(\mathbf{B}(\mathbf{B}_0)) \rangle = \frac{aK_D}{N_{ex}} \sum_{j=1}^{N_{ex}} \frac{1}{9} + \left(1 - \frac{1}{9}a\right) U_0 \sum_{i=1}^N e^{-\frac{2\sqrt{\left(x_{2ij} - x_{1ij}\right)^2 + \left(y_{2ij} - y_{1ij}\right)^2 + \left(z_{2ij} - z_{1ij}\right)^2} - l_0}{L}} \times \\ \times \text{Tr} \left\{ \hat{P}_S, \hat{\rho}_S \left(\mathbf{r}_{1ij}, \mathbf{r}_{2ij} \mid \mathbf{B}(\mathbf{r}_{1ij} \mid \mathbf{B}_0), \mathbf{B}(\mathbf{r}_{2ij} \mid \mathbf{B}_0) \right) \right\} \tau$$

где K_D - константа скорости диффузионных (некоррелированных) встреч, a - вероятность Т-Т-аннигиляции в единичном «контакте», \hat{P}_S - оператор проектирования на синглетное спиновое состояние Т-Т-пары.

$$\text{Средний магнитный эффект реакции: } \langle \gamma(\mathbf{B}_0) \rangle = \frac{\langle K(\mathbf{B}(\mathbf{B}_0)) \rangle - K(0)}{K(0)}.$$

Результаты исследования

Расчеты для диффузионной части задачи показаны на рисунке 1. Представлен пример генерации траектории броуновского движения Т-молекул (1), (2) в объеме между поверхностью наночастицы и внутренней поверхностью нанореактора (рис.1b). Виден классический результат более быстрого затухания скорости $\langle \chi(t) \rangle$ при увеличении коэффициента диффузии D Т-молекул. На рисунках 1c, d представлены угловые и радиальные распределения (гистограммы) средней объемной плотности вероятности $\langle PDF \rangle$ для местоположений Т-молекул ((1) - зеленый контур, (2) – красный контур). Первая встреча Т-Т-пары происходила на полюсе ($\theta'_{1(2)} \approx \varphi'_{1(2)} \approx 0^\circ$) частицы на расстоянии 1 нм от поверхности частицы и стенки реактора.

Кривые магнитного эффекта $\langle \chi(t) \rangle$ реакции в зависимости от D для однородного магнитного поля показаны на рисунке 2a. Интерес представляют кривые магнитного эффекта $\langle \chi(t) \rangle$ для неоднородного магнитного поля показанные на рисунке 2b. Как можно видеть точка $\langle \chi(t) \rangle$, соответствующая значению $B_0 = 0$ в однородном поле смещена.

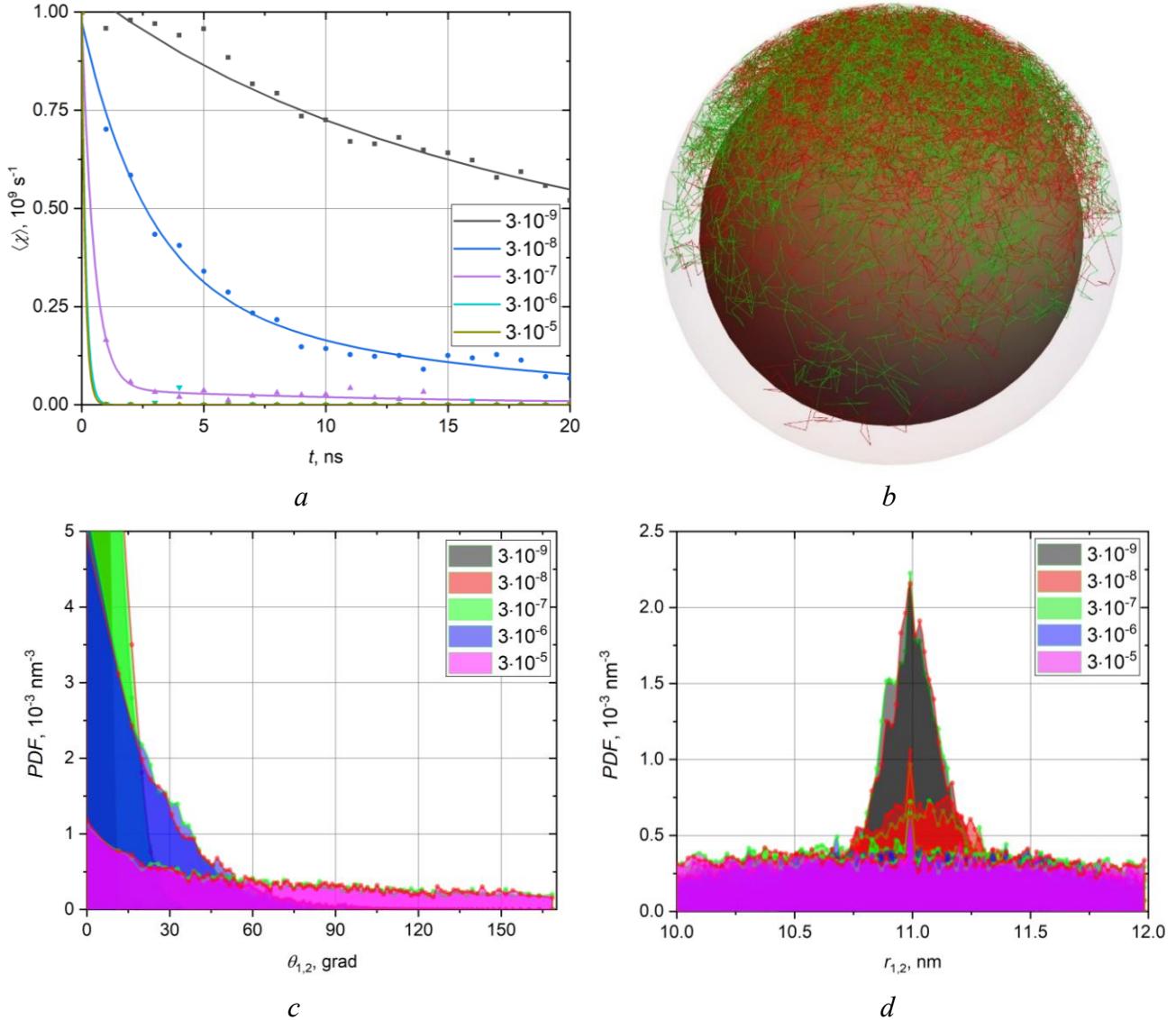


Рис. 1. Моделирование методом броуновской динамики неселективной по спину средней скорости $\langle \chi(t) \rangle$ при различных значениях коэффициента диффузии $D = D_1 = D_2$ ($\text{см}^2/\text{с}$) (a), пример моделирования траектории броуновского движения [первой](#) (1) и [второй](#) (2) Т-молекул ($D_{1(2)} = 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$) (b) угловое распределение объемной плотности вероятности PDF нахождения молекул (1), (2) в зависимости от D (c), радиальное распределение объемной плотности вероятности PDF нахождения молекул (1), (2) в зависимости от D (d).

Параметры моделирования: $R_{np} = 10 \text{ нм}$, $R_{re} = 12 \text{ нм}$, $U_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$, $L = 0.2 \text{ нм}$, $l_0 = 0.2 \text{ нм}$, ($r_{0_{1(2)}} = 11 \text{ нм}$, $\theta'_1 = 0^\circ$, $\theta'_2 = 1.15^\circ$, $\varphi'_1 = \varphi'_2 = 0^\circ$ - начальные координаты Т-молекул)

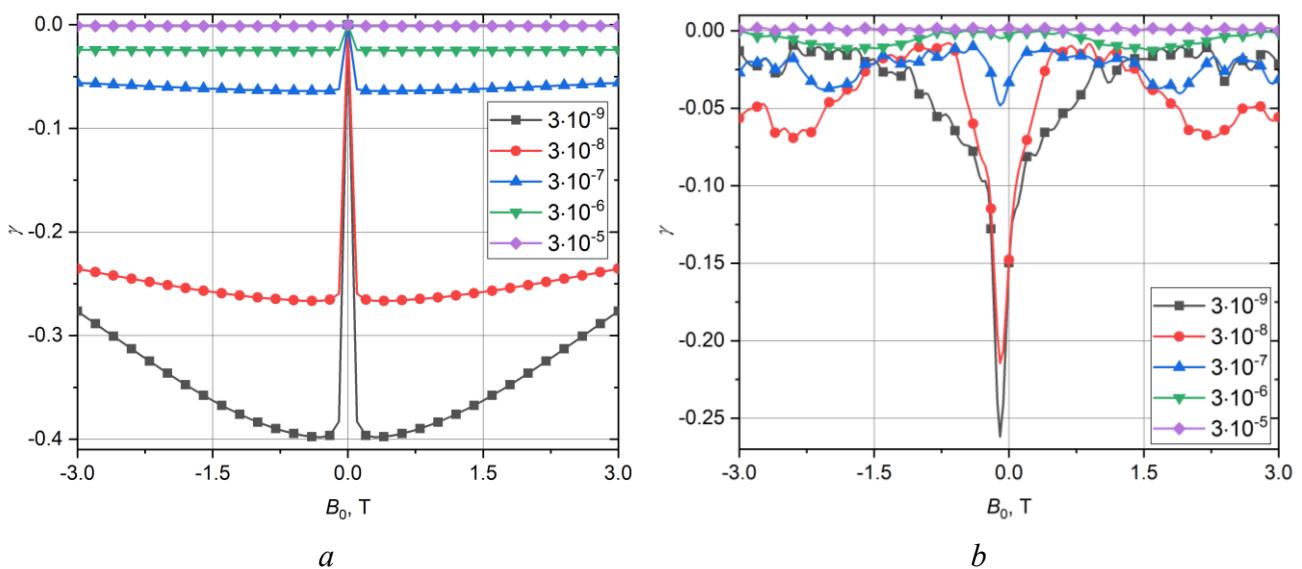


Рис. 2. Результаты расчетов магнитного эффекта $\gamma(B_0)$ при различных значениях коэффициента диффузии $D=D_1=D_2$ ($\text{см}^2/\text{с}$) для случая однородного и изотропного поля $\mathbf{B}=\mathbf{B}_0$ ($|\mathbf{B}_0|=|\mathbf{B}_1|=|\mathbf{B}_2|$) (a), для случая неоднородного и анизотропного поля $\mathbf{B}=\mathbf{B}_0+\mathbf{B}_{np}$ ($|\mathbf{B}_1|\neq|\mathbf{B}_2|$) (b).

Параметры моделирования: $K_{-1}=10^6 \text{ с}^{-1}$, $\omega_{\text{exc}}=10^7 \text{ с}^{-1}$ – частота обменного взаимодействия, ($g_1=2.003$, $g_2=2.0035$ – g-факторы молекул (1), (2)), ($D_1=9\cdot10^{-6} \text{ эВ}$, $E_1=9\cdot10^{-7} \text{ эВ}$, $D_2=5\cdot10^{-6} \text{ эВ}$, $E_2=8\cdot10^{-7} \text{ эВ}$ – постоянные тонкой структуры), $M=4.71\cdot10^{-4} \text{ А/нм}$ – значение остаточной намагниченности материала наночастицы, $\mu_1=100$, $\mu_2=1$

Значение, на которое она смещена, равно значению внешнего поля B_0 , которое необходимо приложить, чтобы суммарное локальное поле было равно нулю $\mathbf{B}_{np}(\mathbf{r}_{1(2)}|B_0=0)-\mathbf{B}_0(\mathbf{r}_{1(2)})=0$. Главный вывод, который можно сделать для магнитного эффекта $\chi(t)$ ТТА в неоднородном поле состоит в том, что каждое перемещение Т-молекул на расстояния $l_{1,2}$ за время $t=N\tau$ при разнице в значениях локальных полей $\Delta B_{1,2}=B_1-B_2$ приводит к появлению N микрорезонансов в структуре $\chi(t)$, положение, ширина и амплитуда каждого из которых пропорциональна всем этим трем величинам в единичном акте аннигиляции.

Список литературы

1. Collins A. R. Ambient solid-state triplet-triplet annihilation upconversion in ureasil organic-inorganic hybrid hosts. / Collins A. R., Zhang B., Bennison M. J., Evans R. C. // J. Mater. Chem. C. - 2024. - Vol. 12. - 6310 - DOI: 10.1039/D4TC00562G.

2. Kucherenko, M. G. Delayed Fluorescence of Molecules on the Surface of a Layered Ferroplasmonic Nanoparticle / M. G. Kucherenko, I. R. Alimbekov, P. P. Neyasov // Technical Physics. - 2022. - Vol. 67, issue 9. - P. 632-643. - 12 c.

КОРРЕЛЯЦИЯ ЦВЕТОМЕТРИЧЕСКИХ И ФРАКТАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ СО СТРУКТУРНЫМИ ИЗМЕНЕНИЯМИ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ ПРИ УМЕРЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Цветкова Е.В.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Аннотация: Изучено влияние 30-тиминутного нагрева до 180 °С на морфологию частиц полиминеральных (ПМК) и монтмориллонит содержащих (М-ПМК) комплексов. Структурные изменения оценивали по изображениям, полученным с помощью оптических микроскопов, применяя цветометрические и фрактальные методы анализа. Установлено наличие агломератов и увеличение фрактальной размерности частиц полиминерального комплекса и их уменьшение для М-ПМК

Ключевые слова: дисперсная система, полиминеральный комплекс, белизна, желтизна, фрактальная размерность.

Современные технологии производства керамических материалов с заданными свойствами зачастую требуют прецизионных или подробных исследований структурных трансформаций исходного сырья. Такой перманентный мониторинг состояния дисперсной керамической массы при внешних воздействиях, в первую очередь, температурных, необходим для решения задачи воспроизводимости конечных результатов. Основным внешним воздействием на дисперсную систему, состоящую из частиц природных полиминералов является температура – при сушке и спекании изделий. Структурные трансформации, в свете современных представлений, идут одновременно на нескольких структурных (макро-, мезо- и микро-) уровнях, изучение каждого требует специального оборудования, методов и рабочего времени. В связи с эти морфологические изменения, происходящие в дисперсных частицах на макроуровне, так называемые процессы морфологического упорядочения, рассматриваются как малоинтересные. Однако именно они закладывают будущие структурные трансформации и, в конечном итоге, структуру и качество керамики [1-4].

Структурные изменения дисперсных систем оценивали по изображениям, полученным с помощью оптических микроскопов, применяя цветометрические и фрактографические методы анализа [8-10].

Изучение морфологии поверхностных слоёв дисперсных систем только с

помощью оптической микроскопии не позволяет получить полную информацию о строении поверхностей минералов из-за того, что реальные поверхности включают структурные элементы различного масштаба – в миллиметровых, микронных и наноразмерных диапазонах. Методами колориметрической или цветометрической градации автором оценены изменения цветовых компонент R (красный), G (зелёный), B (синий), коэффициентов отражения R_0 , белизны W и желтизны Y по оптическим изображениям трёх дисперсных проб: эталонной и двух природных. Коэффициенты белизны и желтизны оценивали по формулам [11, 12], соответственно; коэффициенты отражения R_0 – по формуле:

$$R_0 = (R + G + B) / 3 \quad (1)$$

Метод фрактального анализа широко используется в материаловедении и представляет собой показатель меры заполнения пространства фрактальной структурой. Фрактальные размерности реальных объектов зависят от внешнего воздействия, от внутренних характеристик материалов, а изменения их значений свидетельствуют о структурных изменениях. В данном случае фрактальная размерность анализируемого объекта рассчитана по формуле [13]:

$$D_S = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln M(\varepsilon)}{\ln \frac{1}{\varepsilon}}, \quad (2)$$

где $M(\varepsilon)$ – минимальное число ячеек со стороной ε , необходимых для покрытия всех элементов изображения.

Для исследования были выбраны порошки (эффективные диаметры частиц $d \leq 160$ мкм) эталонного рутила (TiO_2) и двух типичных полиминеральных комплексов Оренбургской области. Температурная обработка в муфеле при 180^0 в течение 30 минут заканчивалась охлаждением порошков с печью. Изображения исследуемых порошков приведены на рисунке 1.

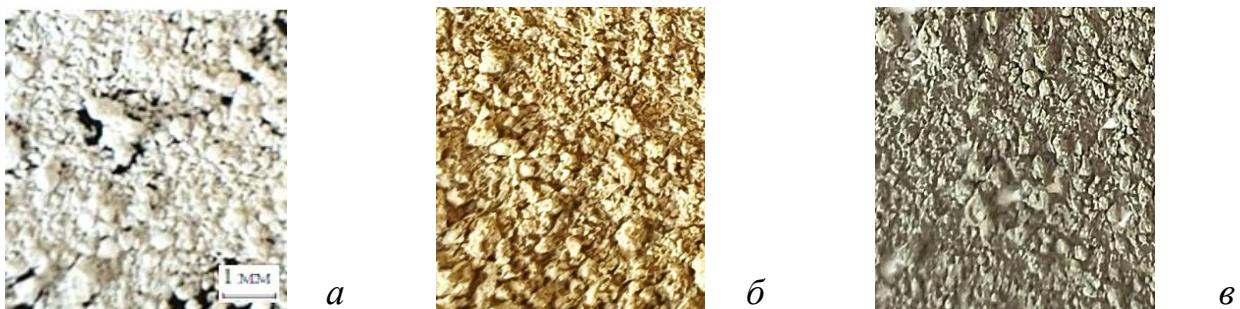


Рисунок 1 – Частицы рутила (а), полиминерального комплекса (ПМК) (б) и ПМК с высоким содержанием монтмориллонита (М-ПМК) (в)

Химические составы объектов исследования приведены в таблицах 1 – 2. В таблицах проиндексировано, что «1» – исходный порошок, «2» – после

сушки при 180 °С. После сушки в химических составах глин произошли изменения – увеличилось относительное содержание диоксида кремния, уменьшилось содержание оксидов железа, водорастворимых примесей и летучих соединений, несвязанной воды (п.п.п*). Химический состав порошка TiO_2 не изменился.

Таблица 1 – Химический состав диоксида титана

Соедин.	TiO_2	F	V_2O_5	MgO	BaO	Fe_2O_3	SiO_2	La_2O_3
масс, %,	96,77	1,71	1,09	0,11	0,09	0,08	0,06	0,03

Таблица 2 – Химический состав частиц

Оксид	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	K_2O	CaO	TiO_2	SO_3	MgO	п.п.п*
ПМК [14]									
1) масс. %	49,09	34,19	8,74	2,16	1,43	1,41	1,20	0,76	9,84
2) масс. %	55,21	35,72	3,99	1,70	0,48	1,06	0,34	0,85	8,76
М-ПМК [15]									
1) масс. %	50,45	25,22	12,54	4,24	0,71	1,17	-	3,24	9,11
2) масс. %	57,50	24,62	7,24	3,54	0,58	0,92	-	3,24	7,12

Влияние температурной обработки на морфологию частиц оценивали по независимым структурным характеристикам. Результаты оценки цветометрических и фрактальных параметров приведены таблице 3.

Таблица 3 – Морфологические характеристики частиц

Образец	d, отн.ед.	W, отн.ед.	Y отн.ед.,	R_0 , отн.ед.	D_s сп.
TiO_2 1)	1	0,60	0,62	0,61	$1,8060 \pm 0,01$
TiO_2 2)	1,04	0,63	0,65	0,63	$1,7848 \pm 0,01$
ПМК 1)	1	0,56	0,41	0,22	0,40
ПМК 2)	1,15	0,43	0,32	0,68	0,48
М-ПМК 1)	1	0,54	0,51	0,48	0,51
М-ПМК 2)	1,08	0,55	0,52	0,49	0,52

Незначительные повышения коэффициентов белизны и желтизны обусловлено удалением влаги. Морфологические изменения связаны только с уменьшением фрактальной размерности на 9% из-за образования более извилистых поверхностей мезоструктурных элементов. В полиминеральной

глине произошли существенные морфологические изменения: коэффициент отражения повысился из-за заметной агломерации, (размер частиц увеличился на 15%) и выравнивания поверхностей (значение D_s выросло на 6%), при этом цвет образца сместился в сторону синего, что связано с фазовыми или полиморфными превращениями. Значения цветовых параметров близки друг к другу, поэтому система М-ПМК имела серый цвет при достаточно высоком коэффициенте отражения. Произошла незначительная агломерация частиц практически без изменения качества их поверхности.

Наиболее чувствительной к нагреву до 180⁰С стала ПМК-система, в которой начинают развиваться процессы полиморфных превращений и укрупнение частиц. М-ПМК оказался более «термоустойчивым». Эти выводы могут быть полезными при построении технологической цепочки получения функциональных керамических материалов из различных типов природных полиминеральных комплексов.

Список литературы

1 Шахов, С. А. Управление структурной организацией дисперсных систем при получении керамики методом горячего литья / С. А. Шахов. – Новосибирск: Сибирский государственный университет путей сообщения, 2012. – 163 с.

2 Дисперсионный анализ монтмориллонитосодержащей глины Оренбуржья / О. Н. Каныгина, О. С. Кравцова, И. Н. Анисина [и др.] // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2011. – № 12(131). – С. 393-395. – EDN OWSMRV.

3 Цветкова, Е. В. Эволюция гранулометрического состава природной каолиновой глины Оренбуржья при высоких температурах / Е. В. Цветкова, О. Н. Каныгина // Проблемы экологии Южного Урала : Сборник материалов IX Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, Оренбург, 17–18 октября 2019 года / Главный редактор Г.В. Карпова. – Оренбург: Издательство Дом Педагогики, 2019. – С. 169-175. – EDN KOXUXJ.

4 Каныгина, О. Н. Структурные трансформации как проявление самоорганизации в керамическом материале / О. Н. Каныгина, А. Г. Четверикова, Д. К. Четверикова // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Материалы Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 01–03 февраля 2024 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2024. – С. 3554-3558. – EDN CSAUCW.

5 Синтез нанопорошка карбида вольфрама WC при воздействии СВЧ электромагнитного излучения на нанокомпозит системы W-C, полученный в

термической плазме / А. В. Водопьянов, А. А. Сорокин, С. В. Синцов [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2020. – № 1. – С. 50-56. – DOI 10.30791/0015-3214-2020-1-50-56. – EDN НАВИРЕ.

6 Chetverikova, A. G. Evolution of phase morphology in dispersed clay systems under the microwave irradiation / A. G. Chetverikova, M. M. Filyak, O. N. Kanygina // Ceramica. – 2018. – Vol. 64, No. 371. – P. 367-372. – DOI 10.1590/0366-69132018643712354. – EDN YBQOJN.

7 Алексеева Н. А., Цветкова Е. В. Обработка в СВЧ-поле глины со сложным полиминеральным составом //Университетский комплекс как региональный центр развития образования, науки и культуры.–Оренбург: ОГУ. – 2021. – С. 2672-2679.

8 Номоев, А. В. Фрактальная размерность границ зерен керамики с нанодисперсными добавками / А. В. Номоев, Л. С. Викулина // Журнал технической физики. – 2012. – Т. 82, № 12. – С. 139-142. – EDN RCUNBL.

9 Фрактальный формализм в применении к анализу СВЧ-модификации нативной глины / М. М. Филяк, А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина, Л. С. Багдасарян // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2016. – Т. 18, № 4. – С. 578-585. – EDN XDGAXT.

10 Доломатов, М. Ю. Природа цвета углеводородных многокомпонентных систем и их цветовые характеристики / М. Ю. Доломатов, Г. У. Ярмухаметова // Башкирский химический журнал. – 2009. – Т. 16, № 2. – С. 62-67. – EDN KTWBST.

11 ГОСТ 16873-92 Пигменты и наполнители неорганические. Методы определения цвета и белизны. – Москва: Стандартинформ. 2007. –8 с.

12 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016619312 Российская Федерация. Программа для расчета цветовых параметров L, a, b и L, u, v по оптическим изображениям керамических материалов : № 2016617020 : заявл. 01.07.2016 : опубл. 17.08.2016 / А. Г. Четверикова, О. Г. Каныгина, Л. В. Межуева ; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет». – EDN MKMDHD.

13 Встовский Г.В. Элементы информационной физики - Москва : МГИУ, 2002, 258.

14 Каныгина, О. Н. Морфологические особенности частиц полиминеральной глины Оренбургской области / О. Н. Каныгина, О. П. Кушнарева, А. С. Аржаных // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : сборник материалов Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 26–27 января 2023 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2023. – С. 4399-4405. –

EDN RXTMBR.

15 Каныгина, О. Н. Морфология дисперсных частиц монтмориллонитсодержащей глины / О. Н. Каныгина, О. П. Кушнарева, В. А. Бабичева // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : сборник материалов Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 26–27 января 2023 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2023. – С. 4406-4412. – EDN ZJLXSY.

ПРИМЕНЕНИЕ ВЕЙВЛЕТ-СПЕКТРОГРАММ ДЛЯ АНАЛИЗА МЕЗОСТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Филяк М.М., Каныгина О.Н., Четверикова А.Г., Макаров В.Н.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Вейвлет-анализ керамических поверхностей – передовая междисциплинарная область исследований, объединяющая физическое материаловедение и математическую обработку сигналов. Исследование посвящено выделению структурных элементов керамической поверхности на мезоуровне и оценку их размеров с помощью вейвлет-спектрограмм. В результате установлена зависимость размеров структурных элементов (ячеек и пор) керамических образцов от температуры обжига.

*Ключевые слова: вейвлет-преобразование, структурный элемент,
керамика*

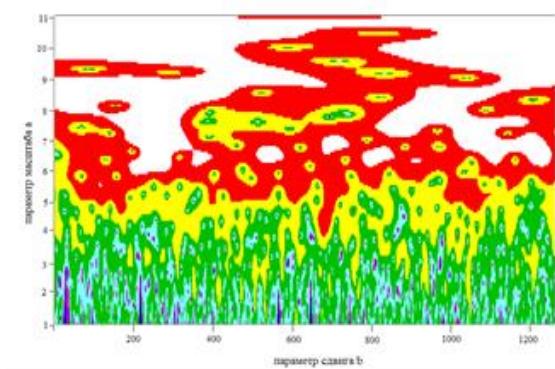
Динамично расширяющиеся спектры требований, предъявляемых к новым керамическим материалам, требуют как разработки новых технологических приёмов, так и развития новых экспрессных и неразрушающих методов исследования этих материалов. Вейвлет-преобразование – это мощный математический инструмент, используемый для неразрушающего контроля строение сложных систем, поскольку он обеспечивает многомасштабное локализованное представление пространственных и структурных особенностей. Он является предпочтительным при анализе поверхности конденсированных сред, поскольку "устраняет разрыв между методами реального и Фурье-пространства" [1], предлагая "универсальный, устойчивый к помехам и многомасштабный подход" к пониманию сложных пространственных структур [2]. Вейвлет-анализ керамических поверхностей – это передовая междисциплинарная область исследований, объединяющая материаловедение, обработку сигналов и производственное применение. Несколько стран лидируют в этой области благодаря своим сильным академическим институтам, передовым разработкам в области керамики и промышленным исследованиям *in situ*. Наиболее активно на мировом уровне в данном направлении работает Shanghai Institute of Ceramics (Chinese Academy of Sciences, Китай), использующий вейвлет-анализ для идентификации дефектов керамических изделий на производстве [3]. В России исследованиями в этой области

занимаются несколько научных групп и организаций, связанных с физикой и химией материалов, успешно ведутся работы по неразрушающему контролю композитов и керамики, опирающиеся на результаты вейвлет-анализа изображений их поверхностей [4-5].

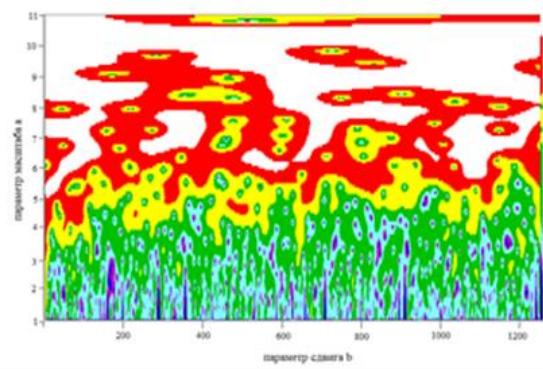
Настоящее исследование включает в себя выделение структурных элементов керамической поверхности на мезоуровне и оценку их размеров с помощью вейвлет-методов, регистрацию признаков рекристаллизации. В качестве сырья для получения керамических образцов использовали среднедисперсные порошки с эффективным диаметром частиц $d \leq 40$ мкм полиминерального комплекса, подробно описанного в работе [6]. Технология изготовления керамических образцов поэтапно изложена в работе [7]. Термическую обработку исходных (25 °C) образцов со скоростью нагрева 10 К/мин производили при температурах, °C: 1000, 1050, 1100, 1150, 1200 и 1250 (с часовой выдержкой).

В качестве структурных элементов обожжённой поверхности оценивали размеры пор (малые структурные элементы) и размеры областей, ограниченных сетью трещин. Для анализа изменения структурных элементов в процессе обжигов при высоких температурах строили вейвлет-спектрограммы, позволяющие выявлять непротяжённые локальные особенности, которые могут быть незаметны при традиционном анализе. Было применено одномерное вейвлет-преобразование (Морле) для разложения изображения на несколько масштабов (11), подробно описанное в работах [8, 9].

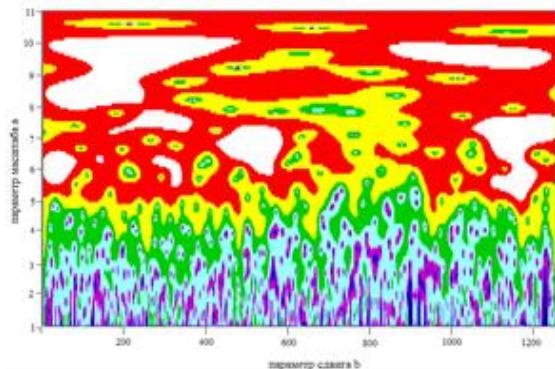
Вейвлет-спектрограммы представляли собой многомасштабное распределение вейвлет-коэффициентов на вейвлет-плоскости (изображение текстуры поверхности) [10]. Было построено 7 спектрограмм (рисунок 1) – для исходного и обожжённых образцов. Вертикальная ось (цифры от 11 до 1) отвечала за уровни или масштабы вейвлет-разложения. Большие значения (11) соответствовали более грубым масштабам (более широким характеристикам), а меньшие (1) – более мелким масштабам (детализированным характеристикам). Горизонтальная ось (значения от 200 до 1200 в мкм) определяла расстояние вдоль керамической поверхности. Интенсивность или цвет на спектрограмме отражали величину вейвлет-коэффициентов.



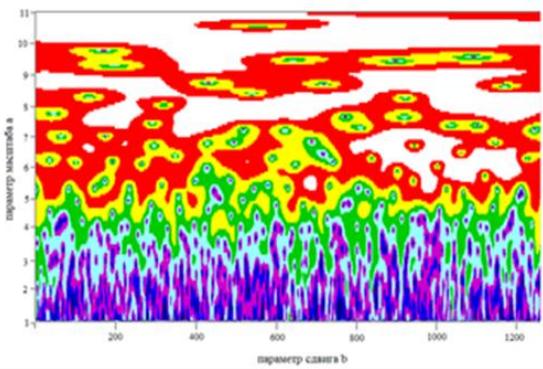
а



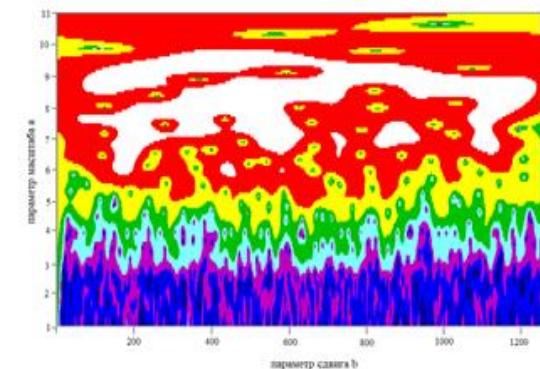
б



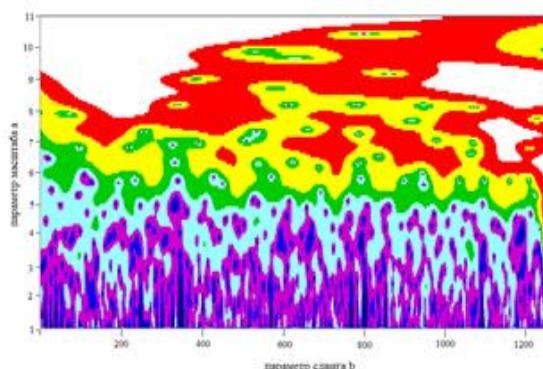
в



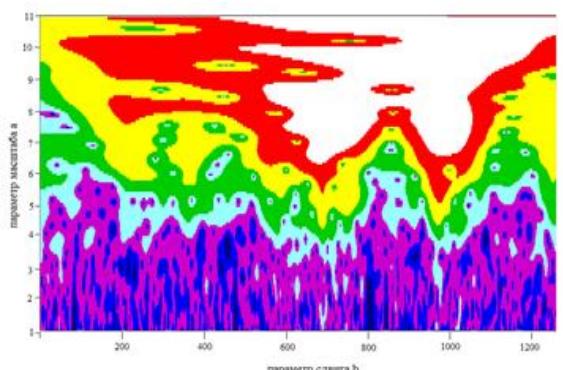
г



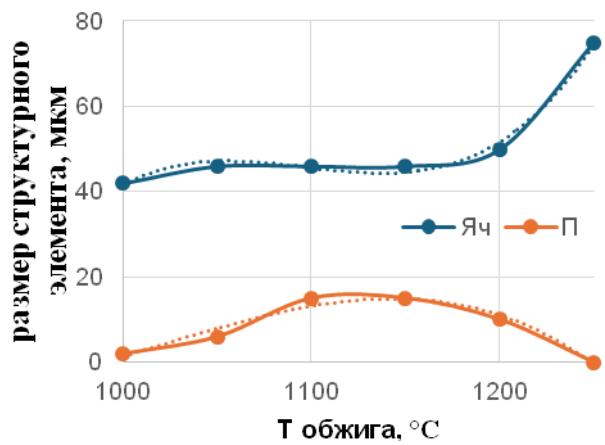
д



е



ж



з

Рисунок 1 – Вейвлет-спектрограммы для исходного образца (а), и обожжённых при 1000 (б), 1050 (в), 1100 (г), 1150 (д), 1200 (е) и 1250 °C (ж); зависимости размера мезоструктурных элементов от температуры обжига (з): Яч – ячеек, П – пор

Наличие высоких коэффициентов в мелких масштабах указывали на тонкую текстуру (поры), а коэффициенты в крупных масштабах – на области поверхности, находящиеся между трещинами.

В исходном образце (рис. 1а) обнаружены структурные элементы размерами от 2 до 40 мкм (поры и ячейки – области, ограниченные границами или трещинами). Они равномерно распределены по всей наблюдаемой поверхности. Профили сечения хорошо коррелировали с базовым вейвлетом на всех масштабных уровнях вплоть до 4,8—5 уровня.

После обжига при 1000 °С (рис. 1б) размеры структурных элементов почти не изменились (от 2 до 42 мкм) и хорошо согласованы с базовым вейвлетом на всех масштабных уровнях вплоть до 4,8—5,2. Несколько снизилась гомогенность структуры, появляются тёмные области.

Обжиг при 1050 °С (рис. 1в) усилил неоднородность поверхности: на отдельных участках поры увеличились до 6—7 мкм. Они стали неодинаковы по размерам и неравномерно распределены. Максимальные размеры ячеек увеличились незначительно – до 46 мкм.

После обжига при 1100 °С (рис. 1г) хаотично распределённые поры вырасли до 15 мкм (темно-синий и фиолетовый фон вейвлет-спектрограмм), размеры стекловидных ячеек сохранились (46 мкм).

На рисунке 1д (1150 °С) видно, что поверхность стала более однородной, при этом размеры пор и ячеек не изменились. После обжига при 1200 °С (рис. 1е) произошла «рекристаллизация» ячеек – их размеры составили от 30 до 70 мкм, при этом размеры пор уменьшились до 7—10 мкм.

Обжиг при 1250 °С (рис. 1ж) завершил рекристаллизацию – размеры ячеек выросли до 70—100 мкм, а поры исчезли, образовался влагонепроницаемый слой.

Эволюция структурных элементов с повышением температур отражает физические и химические процессы, протекающие в керамике: рост и последующее «заличивание» пор, образование крупных ячеек за счёт перехода оксидов железа в «жёлтое стекло», которое привели к изменению цвета поверхности [7]. Эти процессы – изменения цветовых параметров и размеров структурных элементов синергичны.

По результатам измерения размеров структурных элементов построены кривые зависимостей этих процессов от температуры (рис. 1з). Оба процесса – рост ячеек и заливание пор описываются кубическими уравнениями с высоким коэффициентом корреляции – выше 0,96. Следовательно, применение вейвлет-спектрограмм для анализа мезоструктурных элементов керамических материалов целесообразно и обосновано.

Список литературы

1. Kheifetz M. L. et al. Using Wavelet Analysis to Study Structures and Properties of Structural Materials //Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2023. – Т. 26. – №. 4. – С. 385-392.
2. Yu D. et al. Multi-scale decomposition enhancement algorithm for surface defect images of Si₃N₄ ceramic bearing balls based on stationary wavelet transform //Advances in Applied Ceramics. – 2021. – Т. 120. – №. 1. – С. 47-57. <https://doi.org/10.1080/17436753.2020.1858010>
3. Liu Y., Zhou B., Yang X. Wavelet Analysis-Based Texture Analysis of Ceramic Surface Images //Advances in Mathematical Physics. – 2021. – Т. 2021. – №. 1. – С. 1745135. - <https://doi.org/10.1155/2021/1745135>
4. Вейвлет-анализ изображений поверхности керамических материалов как метод измерения размеров её структурных элементов / М. М. Филяк, А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина, И. Н. Анисина // Измерительная техника. – 2020. – № 2. – С. 50-54. – DOI 10.32446/0368-1025it.2020-2-50-54. – EDN NZYDOO.
5. Лебедев, М. Д. Прогнозирование свойств композиционных материалов по микрофотографиям их структуры с помощью вейвлет-анализа / М. Д. Лебедев, О. Б. Бутусов, А. Г. Колмаков // Успехи в химии и химической технологии. – 2023. – Т. 37, № 4(266). – С. 20-25. – EDN EZTRAC.
6. Высокотемпературная трансформация структур полиминерального комплекса / А. Г. Четверикова, В. Н. Макаров, О. Н. Каныгина [и др.] // Журнал технической физики. – 2024. – Т. 94, № 1. – С. 99-108. – DOI 10.61011/JTF.2024.01.56907.167-23. – EDN OLSIEU.
7. Макаров, В. Н. Анализ колориметрических параметров для исследования фазовых переходов керамического материала для создания черепиц / В. Н. Макаров // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Материалы Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 01–03 февраля 2024 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2024. – С. 3474-3478. – EDN BRTKTO.
8. Arneodo A., Decoster N., Roux S. G. A wavelet-based method for multifractal image analysis. I. Methodology and test applications on isotropic and anisotropic random rough surfaces //The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems. – 2000. – Т. 15. – №. 3. – С. 567-600.
9. Филяк, М. М. Определение размеров структурных элементов на поверхности конденсированных сред путем вейвлет-преобразования сгенерированных оптических изображений / М. М. Филяк, А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2018. – Т. 20, № 1. – С. 156-164. – EDN YTGCHY.

10. Фрик, П. Г. Вейвлет-анализ пространственно-временной структуры физических полей / П. Г. Фрик, Д. Д. Соколов, Р. А. Степанов // Успехи физических наук. – 2022. – Т. 192, № 1. – С. 69-99. – DOI 10.3367/UFNr.2020.10.038859. – EDN YVHZXD.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕМОВ В ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ

Якупов Г.С.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Аннотация: в статье предлагается идея использования мемов для лучшего понимания как школьного так и вузовского курса физики. В среде современных учащиеся школ, студенты колледжей и вузов мемы на различную тематику давно завоевали большую популярность, вследствие чего делаются попытки использования их для изучения тех или иных вопросов, понимание которых при подаче их традиционными способами вызывает у учащихся непонимание материала.

Ключевые слова: мем, преподавание физики, проблемы создания качественных мемов.

Преподавание физики – это искусство передачи сложных концепций простым языком. Однако, традиционные методы обучения могут показаться скучными и трудными для восприятия школьниками и студентами. Именно поэтому все больше преподавателей обращаются к новым формам подачи материала, одной из которых является использование мемов.

Мем – это единица культурной информации, передающаяся между людьми посредством интернета. Это может быть картинка, видео или фраза, которая быстро становится популярной благодаря своей юмористической или сатирической природе. Мем позволяет передать сложную идею простыми средствами, часто вызывая улыбку и облегчая понимание.

Одной из первых попыток, показать, что физика наука не чуждая юмора и иронии была книга «Физики шутят» [1], увидевшая свет ещё задолго до появления интернета и мемов. Но учитывая, что книга была издана еще в 60-х годах прошлого столетия, можно предположить, что большая часть современной молодежи с ней просто не знакома.

Преимущества использования мемов в обучении физике:

Улучшение запоминания. Использование мемов помогает студентам лучше запомнить материал. Юмор и визуальные образы делают информацию более доступной и легкой для усвоения. Например, мемы о законах Ньютона могут сделать изучение этих законов более интересным и увлекательным.

Повышение мотивации. Студенты часто теряют интерес к предмету, если считают его слишком сложным или скучным. Мемы помогают привлечь внимание студентов и повысить их мотивацию к изучению физики. Они

создают позитивную атмосферу в классе, способствующую лучшему восприятию материала.

Развитие критического мышления. Создание собственных мемов требует понимания изучаемого материала. Студенты должны уметь анализировать информацию и представлять её в креативной форме. Это способствует развитию критического мышления и творческих способностей.

Использование мемов в преподавании физики может стать эффективным инструментом для повышения интереса студентов к предмету и улучшения восприятия материала. Вот несколько предложений по применению мемов в образовательном процессе:

1. Повышение мотивации: юмор и развлекательные элементы делают обучение менее напряженным и более привлекательным для учащихся.
2. Улучшение запоминания: ассоциации с забавными изображениями помогают студентам легче запомнить сложные концепции и формулы.
3. Создание позитивной атмосферы: использование мема может разрядить обстановку в классе, сделать урок более расслабленным и дружественным.
4. Развитие креативности: создание собственных мемов студентами способствует развитию творческих способностей и лучшему пониманию материала.

Рекомендации по использованию мемов:

1. Выбор тематически релевантных мемов: используйте мемы, которые непосредственно связаны с изучаемым материалом, чтобы подчеркнуть ключевые моменты.
2. Умеренность: избегайте чрезмерного использования мемов, чтобы не отвлекать внимание от основного содержания урока.
3. Обратная связь: регулярно собираите обратную связь от студентов, чтобы убедиться, что мемы воспринимаются положительно и способствуют обучению.
4. Этический аспект: убедитесь, что используемые мемы уважительны и не содержат оскорбительных элементов.

Как следует из сказанного выше создание качественного и эффективного мема довольно сложный процесс. Здесь требуется не только прекрасно владеть преподаваемым материалом, но и обладать хорошим чувством юмора и зачастую навыками владения различными графическими редакторами, так как мем часто предполагает не только текстовое, но и графическое содержание.

Таким образом, использование мемов в преподавании физики может значительно повысить эффективность учебного процесса, делая его более интересным и увлекательным для студентов. При использовании готовых мемов, созданных другими авторами, прежде всего необходимо убедиться, что

они не содержат ошибок и представленная в них информация не искажается. Особенно удобно использовать мемы для создания опорных конспектов, а также использовать в презентациях к учебному занятию, что активно практикуют, например, преподаватели гуманитарных дисциплин. Разумеется, полностью сводить преподавание такой сложной и многогранной дисциплины как физика к использованию мемов недопустимо, но для пробуждения интереса к изучению физики было бы весьма полезно.

Использование мемов в преподавании физики – это эффективный способ привлечения внимания студентов и улучшения качества обучения. Они позволяют сделать сложные концепции доступными и интересными, а также способствуют развитию критического мышления и творческих способностей. Поэтому преподаватели должны рассмотреть возможность включения мемов в свою педагогическую практику.

Список литературы

1. «Физики шутят. Под общей редакцией доктора Физ. мат. наук в. ТУРЧИНА»: Мир; Москва; 1966.
2. Генденштейн Л. Э., Курдюмов М. Л., Вишневский Е. И. Открываем законы физики. Механика. – М.: Мир, 1992. – 265 с., ил. ISBN 5-03-002944-3

КЛИПОВОЕ МЫШЛЕНИЕ И ФИЗИКА

Якупов Г.С.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Аннотация: в данной статье предпринята попытка осветить актуальные трудности, с которыми сталкиваются педагоги общеобразовательных учреждений, а в перспективе и профессора университетов. Эти трудности так или иначе соотносятся с феноменом, известным как "клиповое мышление". Более того, автор стремится продемонстрировать важность дисциплин естественнонаучного цикла и их потенциальную роль в предотвращении или смягчении этого неблагоприятного фактора, влияющего на образовательный процесс.

Ключевые слова: современное образование, школа, клиповое мышление, естественные науки.

В современном мире информация становится всё доступнее и быстрее усваивается благодаря интернету и цифровым технологиям. Однако вместе с этим возникает феномен клипового мышления – поверхностного восприятия информации, быстрой смены внимания и неспособности к глубокому анализу. Как это влияет на изучение физики?

В данной работе предпринята попытка выделить актуальные вызовы, с которыми все чаще сталкиваются педагоги средней и высшей школы, обусловленные феноменом, широко известным как "клиповое мышление". Автор стремится продемонстрировать важность дисциплин естественнонаучного цикла и их потенциальную роль в предотвращении негативного воздействия данного явления на образовательный процесс.

В настоящее время учителя школ, колледжей и вузов выражают серьезную озабоченность по поводу снижения способности учащихся к восприятию объемных текстов, анализу информации и формулированию самостоятельных выводов, что приводит к снижению эффективности обучения. При выполнении самостоятельных работ учащиеся все чаще прибегают к простому копированию готовых решений из различных источников, предлагающих выполненные задания по школьным предметам, которые широко доступны как в печатном виде, так и в интернете.

Что такое клиповое мышление? Клиповое мышление характеризуется следующими особенностями:

- быстрое переключение между разными источниками информации.
- поверхностное восприятие фактов без глубокого анализа.

- трудность концентрации на одной задаче длительное время.
- преобладание визуальной информации над текстом.

Эти особенности делают процесс обучения физике сложным, так как эта наука требует именно глубоких размышлений, умения анализировать сложные явления и применять математические методы.

Проблемы изучения физики при клиповом мышлении

Сложность понимания сложных концепций

Физика включает множество абстрактных понятий, таких как квантовая механика, теория относительности и термодинамика. Эти концепции требуют длительного погружения и постепенного усвоения материала. При клиповом мышлении ученик может быстро перейти к следующему материалу, не осознавая сути предыдущего.

Неспособность сосредоточиться на задачах

Решение физических задач часто занимает много времени и требует последовательного подхода. Ученик с клиповым мышлением может легко отвлекаться на постороннюю информацию, не завершив задачу полностью.

Недостаточное развитие критического мышления

Критическое мышление играет ключевую роль в изучении физики. Оно позволяет ученику проверять гипотезы, оценивать достоверность источников и находить ошибки в рассуждениях. Если ученик привык получать готовые ответы, он теряет способность самостоятельно рассуждать и сомневаться.

Способы преодоления трудностей

Несмотря на трудности, существуют способы адаптации к современным условиям и эффективного изучения физики даже при наличии признаков клипового мышления:

- 1) Использование интерактивных методов обучения. Интерактивные симуляции и виртуальные лаборатории позволяют учащимся наглядно увидеть физические процессы и понять их суть. Это помогает преодолеть проблему недостаточной концентрации и развивает интерес к предмету.
- 2) Развитие навыка планирования времени. Организация учебного процесса таким образом, чтобы выделять достаточно времени на изучение каждой темы, способствует лучшему пониманию материала. Планирование также помогает избежать перегрузки информацией и стресса.
- 3) Регулярная практика решения задач. Регулярные тренировки помогают развивать навыки логического мышления и умение работать с большими объемами информации. Важно постепенно увеличивать сложность задач, чтобы поддерживать мотивацию и уверенность учащихся.

Таким образом, несмотря на сложности, вызванные развитием технологий и изменением способа восприятия информации, существует возможность

адаптироваться и успешно изучать физику. Главное – понимать свои слабые стороны и активно работать над их устранением.

Фрагментарное мышление представляет угрозу для социума. Молодое поколение, приученное к восприятию упрощенных образов и коротких видео, утрачивает способность к анализу и осмыслению информации. Это препятствует формированию зрелой личности, лишает умения мыслить критически, четко выражать свои мысли, вести конструктивный диалог, формулировать и реализовывать цели.

Современные средства массовой информации оказывают значительное влияние на социокультурную среду во всем мире. Беспорядочный поток информации не структурируется сознанием, а остается набором несвязанных или слабо связанных фрагментов. Культура современных подростков формируется под воздействием случайных факторов, что приводит к формированию личности, основанной на разрозненных сведениях из различных источников.

Несмотря на то, что полученная информация каким-то образом интегрируется, связи между фрагментами остаются слабыми и неустойчивыми.

Чтобы избежать превращения клипового мышления в доминирующую черту личности, необходимо усилить акцент на естественнонаучных предметах в школьной программе. Именно эти дисциплины формируют целостное восприятие мира, развивают навыки логического мышления и установления причинно-следственных связей. Освоение физики, математики, химии и других подобных предметов стимулирует ученика к анализу и аргументации, а не к пассивному восприятию информации.

Полезно демонстрировать учащимся примеры ученых, внесших значительный вклад в науку, которые были широко образованными личностями с разнообразными интересами, выходящими за пределы их профессиональной деятельности. Другим эффективным методом противодействия клиповому мышлению, способствующим развитию аналитических навыков и умению устанавливать взаимосвязи, является чтение классической литературы.

В противном случае, когда ученик оперирует быстро сменяющимися образами без аналитической обработки информации, нарушается процесс сохранения осознанных знаний из-за отсутствия глубокого понимания сути проблемы. Таким образом, проблема клипового мышления остается актуальной задачей, требующей дальнейшего изучения.

Список литературы

1. *Азаренок, Н.В. Клиповое сознание и его влияние на психологию человека в современном мире / Н.В. Азаренок // Материалы Всероссийской юбилейной научной конференции, посвященной 120-летию со дня рождения С.Л. Рубинштейна “Психология человека в современном мире”. – Том 5. Личность и группа в условиях социальных изменений. – М.: Изд-во “Институт психологии РАН”, 2009. – сс. 110–112.*
2. "Клиповое мышление" как отражение перцептивных процессов и сенсорной памяти [Текст] / Т. Н. Горобец, В. В. Ковалев // Мир психологии. - 2015. - № 2. - С. 94-100. - Биб-лиогр.: с. 100
3. *Пудалов, А. Д. Клиповое мышление – современный подход к познанию / А. Д. Пудалов // Современные технологии и научно-технический прогресс: сб. науч. ст. – М.: ИФ РАН, 2011. – С. 34–37.*
4. *Семеновских, Т. В. Феномен клипового мышления в образовательной вузовской среде / Т. В. Семеновских // Науковедение. Эдукология и педагогика. – 2014. – № 5(24). – С. 17–23.*