

СЕКЦИЯ 15

«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ И ИНЖЕНЕРНО- ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»

СОДЕРЖАНИЕ

ВЛИЯНИЕ АГРЕГАЦИИ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ НА ТУШЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, доцент, Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.....	3107
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ Генварева Ю.А., канд. пед. наук, доцент.....	3111
ЭЛЕКТРОННОЕ ОБУЧЕНИЕ В ВЫСШЕМ ОБРАЗОВАНИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКА» Гладышева Ю.А.	3115
ДИДАКТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИНТЕГРАЦИИ КУРСА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ В СИСТЕМУ ПОФЕССИОНАЛЬНОЙ ПОДГОТОВКИ ИНЖЕНЕРОВ МЕДИКО-ТЕХНИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ Ермохина А.Ф., Бакаев А.А., канд. пед. наук.....	3119
ЛОГИКО-СЕМАНТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕМАТИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ ПО ФИЗИКЕ СТУДЕНТА-БУДУЩЕГО ИНЖЕНЕРА Кучеренко М.А., канд. пед. наук, Огерчук А.А., канд. пед. наук.....	3124
КОНФОРМАЦИИ АДСОРБИРОВАННЫХ МАКРОЦЕПЕЙ НА СОСТАВНЫХ НЕЗАРЯЖЕННЫХ ЯНУС-НАНОЧАСТИЦАХ СФЕРИЧЕСКОЙ И ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н.Ю., д-р физ.-мат. наук, доцент.....	3129
ПЛАЗМОННОЕ УСИЛЕНИЕ КРОСС-АННИГИЛЯЦИОННОЙ ЗАМЕДЛЕННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ С УЧАСТИЕМ МОЛЕКУЛ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА В ОПУШКЕ АДСОРБИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПИ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗАРЯЖЕННОЙ НАНОЧАСТИЦЫ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент.....	3138
УПРАВЛЕНИЕ КОНФОРМАЦИЯМИ АДСОРБИРОВАННЫХ МАКРОЦЕПЕЙ НА ЗАРЯЖЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ СОСТАВНОГО ПРОВОДЯЩЕГО НАНОШАРА Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н.Ю., д-р физ.-мат. наук, доцент.....	3147
ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМОННОГО УПРАВЛЕНИЯ СКОРОСТЬЮ БИОХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Халупник С.С.	3155
ГИБРИДНАЯ СРЕДА ДЛЯ ОПТИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМОГО ТРАНСПАРАНТА Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.....	3167
БАЗА ДАННЫХ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ КОМПОЗИТОВ КАК ОСНОВА ДЛЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук.....	3172

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ МНЕМОНИЧЕСКОГО ПРИЕМА ДЛЯ ЗАПОМИНАНИЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ СПЕКТРАЛЬНЫХ СЕРИЙ АТОМА ВОДОРОДА Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук	3176
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ГИБРИДНОЙ ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОЙ НАНОСТРУКТУРЫ НА ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор.....	3179
СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛИПОСОМ С ИНКАПСУЛИРОВАННЫМИ АНТИБИОТИКАМИ Неясов П.П., Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Алимбеков И.Р., Раздобреев Д.А., канд. хим. наук, доцент	3188
МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ В КИТАЙСКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКЕ Огерчук А.А., канд. пед. наук, Анисина И.Н., канд. техн. наук.....	3196
ПЕРЕДАЧА ЭНЕРГИИ ТРИПЛЕТНЫХ ЭКСИТОНОВ МЕЖДУ МОЛЕКУЛЯРНЫМ НАНОКРИСТАЛЛОМ И АДСОРБИРОВАННОЙ НА НЕМ ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПЬЮ Пеньков С.А., канд. физ.-мат. наук Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор	3200
РОЛЬ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКА» В ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТОВ СПЕЦИАЛЬНОСТИ «ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ» Пискарёва Т.И., канд. техн. наук, Анисина И.Н., канд. техн. наук.....	3205
ИНФОРМАТИЗАЦИЯ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА НА ПРИМЕРЕ МАССОВОГО ОТКРЫТОГО ОНЛАЙН – КУРСА «ФИЗИКА ДЛЯ ТЕХНИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ» Цветкова Е.В., Якупов Г.С.	3209
ОБ ИЗМЕНЕНИИ СТРУКТУРНОГО СОВЕРШЕНСТВА КРЕМНЕЗЁМА ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ СВЧ-ПОЛЯ Четверикова А.Г., д-р физ.-мат. наук, доцент Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор	3213
ДЕЗАКТИВАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАНТОВОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ ВБЛИЗИ ПЛАЗМОННОЙ ПОЛУСФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Шихавцов М.А.....	3218
ПОВЫШЕНИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ И ИНТЕРЕСА К ОБУЧЕНИЮ СТУДЕНТОВ ПЕРВЫХ КУРСОВ НА ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЯХ ПО ФИЗИКЕ Якупов Г. С., Цветкова Е. В.....	3227

ВЛИЯНИЕ АГРЕГАЦИИ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ НА ТУШЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

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

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

Донорно-акцепторные (ДА) системы, сформированные на основе фуллереновых наноструктур, играют важную роль в решении ряда задач экологии, медицины и молекулярной электроники [1]. На основе ДА систем создаются молекулярные зонды для экологических, биологических и медицинских приложений, сенсоры для обнаружения ионов тяжелых металлов, люминесцентные метки для визуализации белков, антител, пептидов, нуклеиновых кислот, зонды для диагностики онкологических образований и фотосенсибилизаторы для фотодинамической терапии.

В настоящей работе исследуется влияние агрегации эндоэдральных фуллеренов (ЭМФ) La@C82 на процесс переноса энергии возбуждения (заряда) в донорно-акцепторной системе Эозин - La@C82. Перенос энергии возбуждения (заряда) в исследуемой ДА системе сопровождается тушением люминесценции молекул Эозина.

Измеряли изменение интенсивности люминесценции раствора молекул Эозина Y (ЕО) в диметилформаиде (ДМФА) в процессе его допирования металлофуллеренами (ЭМФ) La@C82.

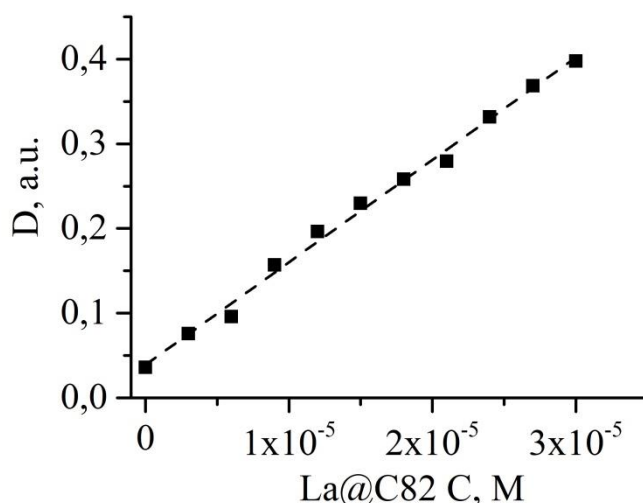


Рисунок 1 Изменение оптической плотности раствора Эозина в ДМФА в процессе его допирования ЭМФ La@C82. Измерения проводились на длине волны 400 нм.

В раствор ЕО (концентрация $C_{EO} = 1.1 \cdot 10^{-5} \text{M}$) добавляли La@C82 в соотношении от 0 до 1/3 по отношению к концентрации красителя. При этом регистрировались спектры люминесценции смеси и ее оптической плотности. Изменения оптической плотности (на длине волны $\lambda=400 \text{ нм}$) исходного раствора ЕО в процессе допирования представлены на рисунке 1. Зависимость оптической плотности смеси от концентрации ЭМФ имеет линейный характер.

На рисунке 2 приведены экспериментальные результаты по тушению люминесценции ($\lambda=630 \text{ нм}$) ЕО эндодральными фуллеренами в координатах Штерна-Фольмера. Наблюдается заметное отклонение экспериментальной Штерн-Фольмеровской зависимости от прямой линии, что свидетельствует о имеющих место кинетических процессах второго порядка.

График тушения люминесценции раствора Эозина в ДМФА металлофуллереном La@C82 (рис.2 кривая 1) удовлетворительно описывается полиномом второй степени:

$$\frac{I_0}{I} = 1 + 2.7 \cdot 10^{-17} C_{EMF} + 1.4 \cdot 10^{-33} C_{EMF}^2, \quad (1)$$

где C_{EMF} - полная концентрация молекул ЭМФ в растворе.

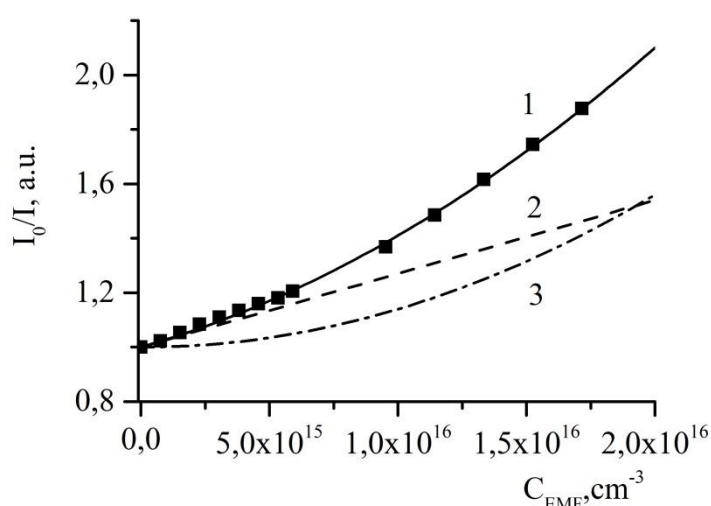


Рисунок 2 Кривая 1 - Тушение люминесценции раствора Эозина в ДМФА металлофуллереном La@C82 . Кривая 3 - Аппроксимация кривой тушения производится полиномом второй степени $I_0/I = 1 + 2.7 \cdot 10^{-17} \cdot C_{EMF} + 1.4 \cdot 10^{-33} \cdot C_{EMF}^2$. Кривая 2 - линейный член аппроксимации, кривая 3 - квадратичный.

Рассмотрим возможные модели тушения, описывающие нелинейный характер зависимости Штерна-Фольмера [2]. Большое значение тангенса угла наклона на начальном участке Штерн-Фольмеровской зависимости ($K_1 \approx 7 \cdot 10^{-17} \text{ см}^{-3}$) и соотношение значения энергии локализации НОМО – ЛОМО молекулярных орбиталей ЕО и La@C82 (таблица 1) указывают на высокую вероятность статического механизма тушения люминесценции. В этом случае коэффициент Штерна-Фольмера определяется вероятностью

формирования комплексов EO+La@C82, которая экспоненциально зависит от величины свободной энергии комплекса [3].

Таблица 1 Энергии локализации НОМО – LOMO молекулярных орбиталей EO и La@C82

	IP (eV) (НОМО)	EA (eV) (ЛОМО)	Ref.
EO	-5.73	-3.4	[4]
La@C82	-6.19	-3.2	[5]

При этом квадратичный ход графика тушения (рис.2) может быть обусловлен комбинацией статического и динамического процессов тушения [2]:

$$\frac{I_0}{I} = (1 + K_{CT} C_{EMF})(1 + K_{ДИН} C_{EMF}) \quad (2)$$

Однако удовлетворительно аппроксимировать экспериментальные результаты зависимостью (2) не представляется возможным.

Результаты предыдущих исследований [6] показали, что ЭМФ в полярных растворителях объединяются во фрактальные кластеры с гидродинамическим радиусом $R=100$ нм. При этом 0.6 часть молекул ЭМФ остается в мономолекулярном состоянии, а 0.4 их часть находится в форме фрактальных кластеров [6]. В этой же работе показано, что изменение ионной силы раствора влечет за собой процесс агрегации ЭМФ молекул. Можно предположить, что в присутствии Эозина, как кислотного красителя, происходит активация процесса агрегации, что может сказаться на кинетике тушения его люминесценции. В процессе допирования раствора красителя раствором ЭМФ очевидно имеет место статическое тушение люминесценции Эозина как его молекулярной, так и кластерной компонентами. Тогда уравнение Штерна-Фольмера (учитывая вышесказанное) принимает вид:

$$\frac{I_0}{I} = (1 + K_1 0.6 \times C_{EMF}) \times (1 + K_2 \frac{0.4 \times C_{EMF}}{N_k}), \quad (3)$$

где K_1 и K_2 коэффициенты ассоциации молекул Эозина с ЭМФ молекулами и кластерами соответственно, N_k - количество ЭМФ молекул в кластере. Величину N_k можно оценить исходя из соотношения размера кластера R с размером отдельной ЭМФ молекулы a и значением фрактальной размерности D_f агрегата: $N_k \approx \left(\frac{R}{a}\right)^{D_f} \approx 10^5$ [6]. Раскрыв скобки в (3) и

исключив члены второго (и выше) порядка малости получим:

$$\frac{I_0}{I} = 1 + K_1 \times 0.4 \times C_{EMF} + K_1 K_2 \frac{0.6 \times 0.4 C_{EMF}^2}{N_k} \quad (4)$$

Первое слагаемое в (4) описывает процесс тушения люминесценции мономолекулярной компонентой ЭМФ раствора. Второе слагаемое описывает процесс тушения люминесценции кластерной ЭМФ компонентой. Сравнивая (1) и (4) можно сделать численные оценки значений констант ассоциации: $K_1 \approx 6.7 \cdot 10^{-17} \text{ см}^3$ и $K_2 \approx 5 \cdot 10^{-23} \text{ см}^3$.

Можно заметить, что коэффициент ассоциации молекул красителя к ЭМФ молекулам K_1 на пять порядков больше коэффициента ассоциации K_2 Эозина с ЭМФ кластерами, что вероятно обусловлено меньшим значением свободной энергии Гиббса ΔG .

Оценка различия величины ΔG для мономолекулярной и кластерной компонент ЭМФ раствора по соотношению $K_a \sim \exp(-\Delta G/kT)$ дает значение $\sim 0.3 \text{ эВ}$.

Обнаружено отклонение экспериментальной Штерн-Фольмеровской зависимости тушения люминесценции органических флуорофоров раствором эндодральных металлофуллеренов от линейной зависимости. Сделано предположение, что аномальный ход Штерн-Фольмеровской зависимости обусловлен влиянием агрегации ЭМФ раствора на процесс тушения люминесценции Эозина. Для объяснения полученных экспериментальных результатов предложена модель статического тушения с константой ассоциации Эозина как с отдельными ЭМФ молекулами, так и с их кластерной компонентой. По параметрам аппроксимации экспериментальных результатов на основе сформированных модельных представлений определены значения констант тушения.

Список литературы

1. Lingsong Wang and Weigang Zhu. Organic Donor-Acceptor Systems for Photocatalysis // *Adv. Sci.* (2024), Vol. 11, pp. 2307227- 2307227.
2. Lakowicz J. R. Principles of fluorescence spectroscopy. (2006) Springer, 3rd ed., 954 с.
3. Бажин Н. М. и др. Термодинамика для химиков / Н. М. Бажин, В. А. Иванченко, В. Н. Пармон. М.: Химия, 2000. 300 с.
4. Sandrine Hazebroucq, Frederic Labat, Daniel Lincot, and Carlo Adamo Theoretical Insights on the Electronic Properties of Eosin Y, an Organic Dye for Photovoltaic Applications // *J. Phys. Chem.* (2008) A, Vol. 112, pp. 7264–7270.
5. Shigeru Nagase and Kaoru Kobayashi. The Ionization Energies and Electron Affinities of Endohedral Metallofullerenes M@C82 (M = Sc, Y, La): Density Functional Calculations // *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* (1994), Vol.16, pp. 1837 – 1838.
6. Э.К. Алиджанов, И.Е. Кареев, В.П. Бубнов, А.И. Котов, С.Н. Летуа, Ю.Д. Лантух, Д.А. Раздобреев. Кинетика самосборки кластеров эндодральных металлофуллеренов в полярном растворителе // *Физика твердого тела.* (2023) Т. 65, №. 9, С.1618-1625.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ

**Генварева Ю.А., канд. пед. наук, доцент
Оренбургский институт путей сообщения – филиал федерального
государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Приволжский государственный университет путей сообщения»**

Технологии искусственного интеллекта активно развиваются и находят свое применение во многих областях и сферах деятельности. Образование в данном случае не является исключением. На сегодняшний день вопрос использования систем искусственного интеллекта в сфере образования является дискуссионным. Научное сообщество высказывает как резко негативное мнение в вопросах применения технологий искусственного интеллекта, так и предлагает к рассмотрению различные разработки и методики по использованию инновационных технологий в обучении различных возрастных групп обучающихся разных уровней образования [1]. Целью нашего исследования является рассмотрение различных технологий искусственного интеллекта и разработка возможных вариантов их применения в преподавании физики.

Возможности, которые предоставляют системы искусственного интеллекта с каждым днем расширяются, как и разнообразие сервисов. В данной научной работе будем рассматривать отечественные разработки и бесплатные сервисы. На сегодняшний день существует большое многообразие программ искусственного интеллекта для работы с текстом. Флагманом является GigaChat — мультимодальная русскоязычная нейросеть от Сбера, которая взаимодействует с пользователем в формате диалога. Работает на русском и английском языках. Следующая по популярности является YandexGPT — аналог ChatGPT в России, разработанный Яндексом. Эта модель ИИ основана на технологии обработки естественного языка и используется для генерации текстов. При работе с нейросетями важно правильно прописывать запрос (промт). На сколько вы правильно сформулируете вопрос, на столько глубоко будет раскрыт заданный вопрос.

Какие преимущества работы с нейросетями может получить преподаватель физики. Если говорить о преподавании физики в средней школе, то здесь масса привилегий. Это написание конспекта урока, подбор заданий различного уровня сложности. Примеры промтов: «Ты опытный учитель физики, напиши конспект урока для учащихся 8 класса по теме: «Электрический ток, условия его существования. Источники электрического тока»; «Ты опытный учитель физики, составь рабочий лист по тексту материала урока, введи 10 разнообразных заданий (на понимание темы, перевод единиц в систему СИ, на соответствие, на множественный выбор, вставку пропущенных слов)»; «Ты опытный методист по физике, предложи варианты

интересной подачи материала по теме: «Действие электрического поля на проводники и диэлектрики».

Также нейросети могут помочь в решении рутинных задач, например можно задать нейросети решение задач и далее она выдаст решение. Для учителя, это помощь в проверке домашнего задания, самостоятельных работ, но для ученика использование нейросетей в решении задач крайне не желательно. Так как, используя нейросети, ученик не сможет самостоятельно решать задачи, понимать логику рассуждения в рассмотрении физических процессов, явлений. Получив готовое решение, учащийся может перестать прикладывать усилия для изучения предмета. На сегодняшний день решение задачи с помощью нейросетей учитель с легкостью распознает: начиная от обозначения величин, отсутствия перевода в систему СИ, свойственная этапность решения, характерные обозначения.

Если же говорить о вузовской программе, то запросы прикладного характера выдают ограниченные ответы, больше описательного характера. Так, например, GigaChat был задан промт: «Ты опытный преподаватель вуза, напиши конспект лекции по теме: "Фазовая кинетика"». Как видим из скрина ответа на данный запрос, что нейросеть ограничилась только планом, содержание ограничено кратким комментарием (Рис.1). Исходя из результатов подобных запросов можем сделать вывод, что количество текстов прикладного характера пока недостаточно. Относительно решения задач по физике вузовской программы можно сказать следующее: «В разных источниках присутствуют специфические обозначения величин, поэтому если студенты используют нейросети в решении задач, то зачастую не могут прокомментировать решение, пояснить ход решения задач, используемые формулы и вводимые обозначения.

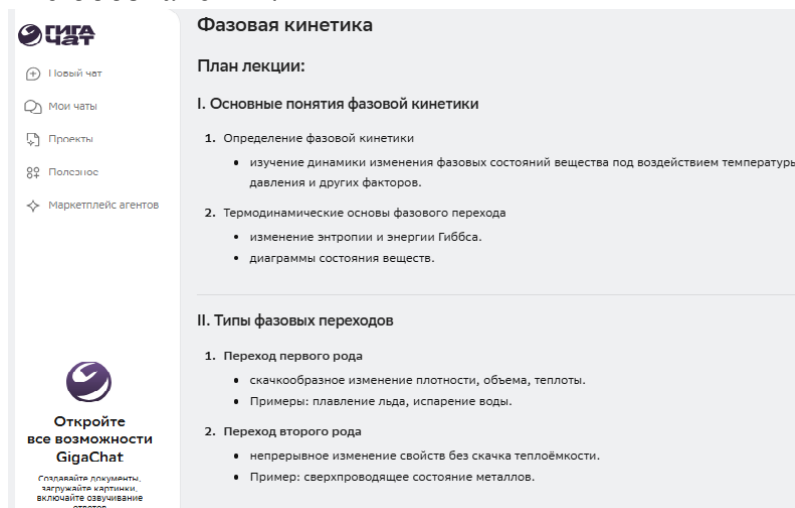


Рисунок – 1 GigaChat результат запроса

Отметим возможности нейросетей в качестве повышения мотивации к изучению физики. Предлагаем следующие творческие задания. Создание медиаобразов ученых, сделавших значимые открытия в области физики, написание текста биографии ученого и сведений о его научном вкладе с

последующей озвучкой нейросетью. Данное задание обучающиеся с удовольствием выполняют, находят интересные факты об ученых и их открытиях. Формат подобных заданий широко используется во внеурочной деятельности современных уроков физики. Данный опыт подробно описан А.С. Юн [3].

Таким образом, проанализировав работу нейросетей в обработке вопросов преподавания физики в школьном и вузовском курсе, можем сделать следующие выводы:

– нейросети хорошо справляются с задачей генерации текста по физике школьного курса; генерируют конспект урока, различные формы урока, уровни заданий. В качестве недостатка можно отметить «своеобразность» языка изложения, которая проявляется в употреблении слов, сложных терминов, которые мы не употребляем в нашей речи, построение сложных предложений. Генерация текстов прикладных вопросов физики не содержит подробной информации;

– в запросах на решение задач нейросети генерируют решение как задач школьного курса так и вузовской программы. Отличительной особенностью является четкая этапность в решении, подробное пояснение хода решения. Однако возможны ошибки в логике решения и вычислениях, поэтому к результатам необходимо относиться критически, проверять решение.

– применение нейросетей во внеурочной деятельности по физике позволяет повысить мотивацию и заинтересованность предметом.

Исходя из вышесказанных преимуществ можем сделать вывод, что нейросети могут оказать преподавателю методическую помощь в подготовке к занятиям, подбору заданий, тестов различных уровней, проверку домашнего задания, самостоятельной работы. Однако, использование учащимися технологий искусственного интеллекта в решении задач крайне не желательно, так как теряется навык самостоятельного решения, желание самостоятельно получать знания.

Список литературы

1. Искусственный интеллект в гуманитарных и прикладных исследованиях / А. Ю. Нагорнова, М. А. Одинокая, А. А. Федюковский [и др.]. – Ульяновск : ИП Кеньшенская Виктория Валерьевна (издательство "Зебра"), 2025. – 321 с. – ISBN 978-5-00275-014-6. – EDN KUYCFL.

2. Генварева, Ю. А. Использование нейронных сетей в образовательных технологиях: преимущества и перспективы / Ю. А. Генварева, И. М. Зырянова, Г. С. Сайфутдинова // Наука и образование: актуальные вопросы теории и практики : Материалы IV Международной научно-методической конференции, Оренбург, 26–27 марта 2024 года. – Самара-Оренбург: Самарский государственный университет путей сообщения, 2024. – С. 390-393. – EDN EMUAKZ.

3. Юн, А. С. Искусственный интеллект и нейросети во внеурочной деятельности современного урока физики / А. С. Юн, Р. О. Сатюков //

Инновации в науке и образовании : Материалы XX Всероссийской научно-практической конференции, Шадринск, 17 марта – 04 2025 года. – Шадринск: Шадринский государственный педагогический университет, 2025. – С. 221-224. – EDN EGJJGT.

ЭЛЕКТРОННОЕ ОБУЧЕНИЕ В ВЫСШЕМ ОБРАЗОВАНИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКА»

Гладышева Ю.А.

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

Современный этап развития общества характеризуется активным внедрением компьютерных и информационно-коммуникационных технологий во все сферы жизнедеятельности человека. Система высшего образования не является исключением и находится в процессе модернизации, ориентированной на повышение качества подготовки специалистов, соответствующих требованиям современных запросов общества. В этих условиях особую актуальность приобретает электронное обучение как инновационная форма организации образовательного процесса.

Электронное обучение (e-learning, онлайн-обучение) позволяет расширить образовательные возможности, обеспечить доступ к учебным ресурсам независимо от места и времени, а также повысить эффективность усвоения учебного материала. Особенно значимым является его применение при изучении фундаментальных дисциплин, таких как физика, играющих ключевую роль в формировании инженерного и научного мышления студентов.

Электронное обучение представляет собой систему обучения, основанную на применении электронных образовательных ресурсов, компьютерных программ, и телекоммуникационных технологий. Оно включает в себя разные форматы обучения, использование определённых технологий, применение образовательных платформ, электронные учебники, онлайн-курсы, виртуальные лаборатории, системы тестирования, диалоговые тренажеры, онлайн-общение между преподавателем и студентами.

В развитии электронного обучения можно выделить несколько этапов: использование учебных материалов на электронных носителях, развитие дистанционного обучения с участием преподавателей и формирование полноценных электронных образовательных сред. Современное обучение с помощью электронных средств позволяет не только передавать знания, формировать навыки и умения, но и осуществлять быстрый мониторинг учебной деятельности, обеспечивать индивидуализацию обучения, анализировать результаты учебной деятельности и при необходимости корректировать учебную траекторию.

Преимущества онлайн обучения заключаются в его доступности и интерактивности, в возможности гибко адаптировать учебный материал под конкретные запросы и цели. Студенты получают возможность самостоятельно планировать учебную деятельность, возвращаться к сложным темам и использовать разнообразные форматы представления информации в удобное для них время.

В высшем образовании электронное обучение широко применяется в рамках смешанной модели, сочетающей традиционные аудиторские занятия и электронные образовательные ресурсы. Это позволяет сохранить преимущества очного обучения и одновременно использовать возможности и потенциал компьютерных технологий.

Для преподавателей электронное обучение открывает возможности по обновлению учебного контента, использованию интерактивных методов обучения и объективному контролю знаний. Системы электронного обучения позволяют отслеживать активность студентов, анализировать результаты тестирования и корректировать учебный процесс в соответствии с уровнем подготовки обучающихся.

Для студентов электронное обучение способствует формированию навыков самообразования, критического мышления и работы с информацией. Эти навыки являются важными составляющими профессиональной компетентности будущих специалистов.

Физика как фундаментальная дисциплина требует не только усвоения теоретических знаний, но и формирования практических и экспериментальных умений. В условиях электронного обучения изучение физики приобретает новые формы и методы, расширяющие возможности традиционного образовательного процесса.

Ключевые преимущества онлайн-обучения в сфере высшего образования по физике - электронные курсы позволяют включать структурированный теоретический материал, видеолекции, анимации физических процессов, интерактивные модели и симуляции. Визуализация физических явлений способствует более глубокому пониманию законов и закономерностей, а также развитию наглядно-образного мышления студентов.

Преимуществом электронного обучения является трансформирование лекционных занятий в интерактивные формы работы. Предварительное самостоятельное ознакомление с теоретическим учебным материалом из электронного курса физики позволяет студентам на аудиторных занятиях обсуждать сложные вопросы, анализировать, приводить примеры применения физических законов и явлений.

Достоинством онлайн обучения на практических занятиях по физике является формирование умений применять теоретические знания при решении уровневых задач. В электронной обучающей среде есть возможность использовать уровневые задания, автоматизированные тренажёры, тематические и промежуточные тесты, что обеспечивает дифференцированный подход к обучению и способствует развитию самостоятельности студентов.

При изучении физики важным элементом обучения является лабораторный практикум. Особое значение в условиях электронного обучения приобретают виртуальные лабораторные работы, позволяющие выполнять эксперименты и получать результаты без использования реальных лабораторных установок и приборов, основанные на компьютерном моделировании физических процессов. Виртуальные лабораторные комплексы

позволяют студентам изменять параметры экспериментов в широких пределах, что не всегда бывает возможным в реальных условиях, наблюдать результаты и анализировать полученные данные. Это способствует формированию исследовательских навыков, развитию логического мышления и пониманию причинно-следственных связей. Внедренный в школьный образовательный процесс виртуальный лабораторный комплекс [1] может применяться и в лабораторном практикуме в высшей школе. Для направлений подготовки специалистов не инженерных специальностей такой формат проведения лабораторной работы позволяет наглядно иллюстрировать эксперименты и явления, моделировать изменение условий, анализировать зависимость одних физических величин от других, что часто является трудным у студентов. Компьютерные технологии позволяют моделировать сложные физические процессы, которые трудно реализовать в условиях реальной лаборатории.

Значимым при использовании виртуальных лабораторных работ будет и фактор, связанный с ограничением материально-технических ресурсов или при необходимости предварительной подготовки студентов к работе с реальным оборудованием. Следует учитывать, что такая форма проведения лабораторного практикума не может полностью заменить реальные лабораторные работы, ее применение направлено на их дополнение, повышая общую эффективность обучения.

К преимуществам электронного обучения при изучении физики относятся повышение мотивации студентов, доступность учебных материалов, возможность индивидуализации обучения и объективного контроля знаний.

Одним из форматов электронного обучения являются разработанные для улучшения процесса обучения обучающие приложения, программное обеспечение и электронные ресурсы, которые сочетают удобство мобильного формата с качественным содержанием. Предназначенные для различных устройств, таких как смартфоны и планшеты, дают возможность бесплатного пользования ресурсами. Применение при обучении физике таких приложений и ресурсов, как Physics Formulas Free, Simple Physics, Feynman Lectures on Physics, The Elements: A Visual Exploration, Photomath, Amazing Science Facts, HyperPhysics, позволяет студентам с интересом осваивать все разделы физики. Некоммерческие проекты различных университетов (например, PhET Interactive Simulations) позволяют создать бесплатные интерактивные симуляции для изучения естественных наук, в том числе и физики.

Онлайн обучение позволяет включить в электронные курсы дополнительные материалы из других дисциплин, связанных с физикой, что способствует реализации междисциплинарных связей в различных формах учебной и самостоятельной работы [2].

Наряду со всеми положительными сторонами электронного обучения необходимо учитывать и факторы, связанные с организацией и внедрением данной формы обучения. Оно требует высокой самоорганизации студентов и наличия соответствующей технической возможности обучаться в онлайн-формате. Минимизация офлайн-общения и практической работы с реальным

оборудованием может снижать эффективность обучения при неправильной организации учебного процесса.

Таким образом, электронное обучение является важным инструментом модернизации высшего образования и эффективным средством повышения качества изучения физики. Использование электронных образовательных ресурсов, интерактивных методов обучения, виртуальных лабораторий, и других составляющих онлайн-обучения способствует индивидуализации обучения, доступности образовательных ресурсов, интерактивности и вовлеченности студентов в учебный процесс, формированию профессиональных и исследовательских компетенций студентов, что в целом способствует интенсификации образовательного процесса и повышению качества усвоения предмета.

Наиболее целесообразным является применение смешанной модели обучения, сочетающей традиционные и электронные формы, что обеспечивает комплексный и качественный подход к подготовке специалистов.

Список литературы

1. Авторские виртуальные лабораторные работы по физике для школы и вуза. Виртуальный лабораторный комплекс. Электронный образовательный ресурс – Режим доступа: <https://efizika.ru/?ysclid=mkt55ddb6qx908459705>
2. Шурыгин В.Ю., Краснова Л.А., Дерягин А.В. Особенности реализации межпредметных связей в преподавании физики в вузе средствами электронного обучения // Балтийский гуманитарный журнал, 2023. Т. 12. № 3(44)

ДИДАКТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИНТЕГРАЦИИ КУРСА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ В СИСТЕМУ ПОФЕССИОНАЛЬНОЙ ПОДГОТОВКИ ИНЖЕНЕРОВ МЕДИКО-ТЕХНИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ

Ермохина А.Ф., Бакаев А.А., канд. пед. наук

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

Целесообразность разработки и внедрения специализированных учебных пособий по молекулярной физике и теплофизике для студентов инженерных специальностей обусловлена объективным противоречием между высоким уровнем абстракции фундаментальных курсов общей физики и прикладным, практико-ориентированным характером деятельности инженера по ремонту и техническому обслуживанию медицинской техники. Традиционные учебно-методические комплексы, построенные по линейному принципу изложения материала, как правило, игнорируют контекст будущей профессиональной деятельности. Это приводит к разрыву межпредметных связей, фрагментарности знаний и, как следствие, к трудностям трансфера теоретических концептов в плоскость решения реальных производственных задач [1].

С точки зрения контекстного обучения, дидактический потенциал дисциплины раскрывается через привязку физических законов к конкретным инженерным задачам [2, 3]. Молекулярная физика и термодинамика в системе подготовки инженера медико-технического профиля выполняют не только мировоззренческую, но и базисную, инструментальную функцию. Они служат фундаментом для освоения специальных дисциплин («Технические методы диагностических исследований и лечебных воздействий», «Медицинские приборы, аппараты, системы и комплексы», «Биотехнические системы медицинского назначения» и др.). Молекулярная физика и термодинамика лежат в основе функционирования широкого спектра медицинской аппаратуры (систем терморегуляции в неонатологии, вакуумные системы в стерилизационном оборудовании и т.д.). Следовательно, педагогическая задача состоит в формировании у студента способности «видеть» за показаниями приборов термодинамические процессы.

Современные учебные издания должны строиться на принципах деятельностного подхода, способствуя развитию аналитического мышления и навыков алгоритмизации решений. Структура пособия должна включать теоретические блоки, верифицированные практикой примеры и разноуровневые задачи, что обеспечит интериоризацию знаний.

В условиях цифровизации инженерного труда необходима интеграция в курс элементов компьютерного моделирования [4]. Методическая ценность численных методов заключается в визуализации невидимых процессов. Студент получает возможность верифицировать теоретические расчеты и

формировать навыки предиктивного анализа работы оборудования.

Учебные пособия по молекулярной физике и теплофизике могут оказать значительное влияние на подготовку будущего инженера по обслуживанию медицинской техники, как минимум, по двум причинам [5]:

- понимание физических принципов поможет инженеру понять основные принципы работы медицинских устройств, таких как томографы, ультразвуковые аппараты и системы терморегуляции. Это понимание необходимо, в том числе, для диагностики и устранения неисправностей оборудования.

- многие медицинские устройства требуют точного контроля температуры, как, например, в случае с инкубаторами для новорожденных или оборудованием для термотерапии. Знания о теплопередаче и теплообмене помогут инженеру оптимизировать работу таких систем и обеспечить их надежность.

Центральным элементом формирования профессиональных компетенций служит лабораторный практикум, реализующий принцип квазипрофессиональной деятельности [6, 7]. При его выполнении преодолевается разрыв «абстрактная формула → физическое явление в устройстве/изделии». Например, студент видит уравнение теплопроводности (Фурье) или закон идеального газа (Клапейрона-Менделеева) на бумаге. В лаборатории же он своими руками собирает установку, имитирующую, например, теплообменник аппарата искусственного кровообращения. Наглядно видит, как изменение расхода жидкости (аналог кровотока) влияет на температуру на выходе. Студент чувствует инерционность тепловых процессов, которую нужно учитывать при программировании термостатов инкубаторов или ПЦР-амплификаторов.

Многие неисправности медицинской техники – это отклонения физических параметров. Лабораторный практикум развивает эту интуицию:

- по тепловизионной камере он изучает, как неравномерность теплоотдачи свидетельствует о плохом контакте (например, в блоке питания лазера).

- работая с калориметром, понимает, что такое теплоемкость и почему алюминиевая часть аппарата нагревается/остывает быстрее, чем стальная. Это важно для поиска перегрева.

- эксперименты с вакуумом и давлением в рамках молекулярной физики дают прямое понимание работы автоклава (где вакуумная фаза критична для стерилизации) или откачки системы МРТ.

Лабораторные работы могут быть сформулированы как кейсы: «Почему в термостате биореактора возникает градиент температуры? Определите коэффициент теплопроводности образца изоляции и предложите решение» или «Рассчитайте и проверьте экспериментально время, необходимое для стерилизации груза в автоклаве заданного объема при разных начальных условиях». Здесь студент действует как инженер: ставит эксперимент, получает данные, анализирует и предлагает решение. Кроме того, именно на этапе

выполнения лабораторных работ, студент учится самостоятельно оценивать достоверность полученных результатов, критично относится к методике проведения эксперимента [8, 9].

Использование учебных пособий по молекулярной физике и теплофизике в образовательном процессе студентов инженерных специальностей способствует углубленному пониманию физических принципов и формирует практические навыки, необходимые для успешной профессиональной деятельности в различных областях инженерии. Для инженера по обслуживанию медицинской техники лабораторный практикум по молекулярной физике и теплофизике – это полигон, где он превращает абстрактные знания в профессиональные рефлексy, физическую интуицию. Это обязательная часть формирования его как специалиста, который не просто «чинит железо», а обеспечивает корректность протекания жизненно важных физических процессов в медицинском оборудовании, обеспечивая тем самым высокую надежность и безопасность её эксплуатации [10].

Список литературы

1. Валиханов, Н. К. Преподавание молекулярной физики для студентов / Н. К. Валиханов // 64-я Международная научная конференция Астраханского государственного технического университета, посвященная 90-летию со дня образования Астраханского государственного технического университета : материалы конференции, Астрахань, 20–25 мая 2020 года. – Астрахань: Астраханский государственный технический университет, 2020. – С. 106. – EDN JRWKZO.

2. Якупов, Г. С. Основные понятия и законы молекулярной физики : учебное пособие для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки, входящим в состав укрупненных групп направлений подготовки 04.00.00 Химия, 11.00.00 Электроника, радиотехника и системы связи, 12.00.00 Фотоника, приборостроение, оптические и биотехнические системы и технологии / Г. С. Якупов, А. Г. Четверикова. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2024. – 106 с. – ISBN 978-5-7410-3254-1. – EDN KDCDNR.

3. Гуньков, В. В. Механика. Молекулярная физика : лабораторный практикум для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки, входящим в состав укрупненных групп направлений подготовки 03.00.00 Физика и астрономия, 04.00.00 Химия, 11.00.00 Электроника, радиотехника и системы связи, 12.00.00 Фотоника, приборостроение, оптические и биотехнические системы и технологии / В. В. Гуньков, А. Г. Четверикова, Ю. А. Гладышева. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2018. – 94 с. – ISBN 978-5-7410-2192-7. – EDN VAMKBL.

4. Садыкова, А. Ю. Информационные технологии в рамках лабораторного практикума при изучении раздела молекулярная физика студентами заочного отделения / А. Ю. Садыкова, Е. В. Бурдова // Философия в

системе «НТПО»: наука, технология, производство, образование : сборник материалов IV Всероссийской научной конференции с международным участием, Казань, 10 ноября 2022 года. – Казань: Редакционно-издательский центр «Школа», 2022. – С. 349-352. – EDN UBISVV.

5. Калашникова, С. А. Особенности изучения вопросов физики и биофизики студентами медицинских вузов / С. А. Калашникова // Проблемы и приоритеты развития науки в XXI веке : Сборник научных статей по материалам Международной научно-практической конференции. В 2-х частях, Смоленск, 30 декабря 2017 года. Том Часть 1. – Смоленск: Общество с ограниченной ответственностью "НОВАЛЕНСО", 2017. – С. 93-96. – EDN VMDRHN.

6. Анисина, И. Н. Роль учебного лабораторного практикума по теплофизике в формировании ПК студентов, обучающихся по направлению 20.03.01 техносферная безопасность / И. Н. Анисина, Е. В. Волков, А. Г. Четверикова // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 01–03 февраля 2017 года / Оренбургский государственный университет. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2017. – С. 1728-1732. – EDN YKCUQH.

7. Лабораторный практикум по теплофизике : учебное пособие для студентов, обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлению подготовки 280700.62 Техносферная безопасность / А. Г. Четверикова, О. С. Кравцова, И. Н. Анисина, Е. В. Волков. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2014. – 109 с. – EDN RDISPZ.

8. Голованова, Е. В. Самостоятельная работа студентов при обучении курсу физики / Е. В. Голованова // ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ и МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ ПЕДАГОГИКИ и ПСИХОЛОГИИ : сборник статей по итогам Международной научно-практической конференции: в 3 частях, Магнитогорск, 04 декабря 2017 года. Том Часть 1. – Магнитогорск: Общество с ограниченной ответственностью "Агентство международных исследований", 2017. – С. 104-106. – EDN ZVVZED.

9. Манаков, Н. А. Самостоятельная работа при выполнении лабораторных работ по физике : методические указания для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлению подготовки "Математические и естественные науки" и "Инженерное дело, технологии и технические науки" / Н. А. Манаков, А. Г. Четверикова, Е. В. Цветкова. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2019. – 25 с. – EDN AEWZER/

10. Голышева, Е. А. Особенности преподавания молекулярной физики в вузе студентам физических специальностей / Е. А. Голышева // Актуальные проблемы обучения математике, информатике, экономике и естественнонаучным дисциплинам в средней и высшей школе : Материалы всероссийской научно-практической конференции, Благовещенск, 25 марта

2019 года / Под общей редакцией Н.В. Ермак. – Благовещенск: Благовещенский государственный педагогический университет, 2019. – С. 25-28. – EDN РКОЕНР.

ЛОГИКО-СЕМАНТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕМАТИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ ПО ФИЗИКЕ СТУДЕНТА-БУДУЩЕГО ИНЖЕНЕРА

**Кучеренко М.А., канд. пед. наук, Огерчук А.А., канд. пед. наук
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

В программном документе Научно-методического совета по физике¹, утвержденном его председателем - академиком РАН Ж.И. Алферовым, заявлено, в частности, что:

1. Одним из принципов структуры примерных программ дисциплины «Физика», входящей в цикл общих математических и естественнонаучных дисциплин для различных направлений подготовки бакалавров, является сохранение высокого уровня фундаментальной подготовки. Подчеркнуто, что именно фундаментальная подготовка может стать основой формирования у обучающихся общенаучных, профессиональных, социально-личностных и общекультурных компетенций.

2. Перечень основных разделов должен оставаться одинаковым для различных направлений подготовки: Механика. Термодинамика и молекулярная физика. Электричество и магнетизм. Колебания и волны, оптика. Квантовая физика. Ядерная физика. Физическая картина мира. Предложены три уровня изучения дисциплины: минимальный (9-11 зачетных единиц; студент способен воспроизводить типовые ситуации и использовать их при решении простейших задач); базовый уровень (14-15 зачетных единиц; студент способен решать сложные задачи, которые требуют знания всей дисциплины); расширенный уровень (18-20 зачетных единиц; студент способен к построению, анализу и модернизации сложной модели объекта или явления).

3. Вне зависимости от уровня изучения физики, студенты должны:

- Знать: основные физические явления и основные законы физики, границы их применимости, применение законов в важнейших практических приложениях; основные физические величины и физические константы, их определение, смысл, способы и единицы их измерения.

- Уметь: указывать какие законы описывают данное явление или эффект; истолковывать смысл физических величин и понятий; объяснять основные наблюдаемые природные и техногенные явления и эффекты с позиций фундаментальных физических взаимодействий; записывать уравнения для физических величин в системе СИ.

Заметим, что из программного документа выделены те положения, которые являются существенными для нашего дальнейшего изложения.

¹Примерные программы дисциплины «физика» федерального компонента цикла общих математических и естественнонаучных дисциплин для гос 3-го поколения: <https://ed.dgu.ru/Content/прогдисцип/Физика.pdf>

Рассмотрим этапы педагогической деятельности в контексте логико-семантического анализа учебных достижений студентов по разделам «Физические основы механики» и «Колебания и волны».

Контрольную работу №1, как одну из составляющих проверки знаний и умений студентов по вышеназванным разделам, выполняли 142 учащихся-первокурсников Института энергетики, электроники и связи (ИЭЭС) следующих направлений подготовки: 13.03.01 Теплоэнергетика и теплотехника; 13.03.02 Электроэнергетика и электротехника; 11.03.02 Инфокоммуникационные технологии и системы связи; 11.03.04 Электроника и наноэлектроника. Тематический контроль состоялся на 7-ой неделе обучения физике. Средний тестовый балл ЕГЭ поступивших на данные направления подготовки обучаемых – 61, что характерно для участников экзамена по физике, освоивших содержание школьного курса, как на базовом, так и на повышенном уровне сложности. Трудоемкость изучения дисциплины «Физика» в ИЭЭС на всех направлениях – 11 зачетных единиц (минимальный уровень изучения).

На подготовительном этапе педагогической деятельности была сформулирована цель: выявить понимание ключевых физических понятий и фундаментальных физических законов механики, определить особенности структуры учебной деятельности по решению типовых физических задач.

Были выделены следующие критерии оценки понимания студентами элементов физического знания, которые ниже приводим с краткой аргументированной базой:

1. Герменевтика - искусство интерпретации текстов как знаково-символических структур, опирается на семиотические методы, как особые методологические средства [1]. В семиотике под знаком, посредством которого передается информация, понимают некоторый объект. Таким объектом могут быть и просто материальный объект, и множество или свойство, отношение или функция, а также событие, ситуация, явление или процесс. Структура знака представлена семантическим треугольником (1923 г., С. Огден, И. Ричардс), в вершинах которого находятся (рисунок 1) денотат – данный человеку в ощущениях объект реальной действительности; значение как возникающий в сознании человека мысленный образ; имя как принятое в человеческом сообществе наименование объекта [2].



Рисунок 1. – Семантический треугольник

В физике физические величины являются знаками-символами. Для таких знаков их форма не дает никакого представления об их содержании. Связь между формой и содержанием всегда устанавливается конвенционально.

Исходя из вышеуказанного, мы сформулировали критерий знания физических величин и умения истолковывать их смысл (Кр): студент знает физическую величину и умеет истолковывать ее смысл, если верно называет ее имя, представляет, какой реально существующий объект представляет физическая величина, правильно формулирует способ ее определения, (т.е., «значение» в семантическом треугольнике), указывает, с какими ранее изученными величинами связана величина выбранная.

2. Первый критерий усвоения физических понятий (Кр1), которые могут быть определены, мы сформулировали на основе науки логики, которая определяет, как должно осуществляться мышление человека (студента) для того, чтобы была достигнута истина. Таким образом, можно утверждать, что понятие усвоено студентом, если он способен определить его при помощи рода и видового отличия, соблюдая четыре логических правила (определение должно быть соразмерным; определение не должно делать круга; определяющее и определяемое должны быть различными и самостоятельными понятиями; определение не должно быть отрицательным) [3].

3. Второй критерий усвоения физических понятий (Кр2) нами определен на основе герменевтической техники "расклеивания" смешиваемых конструктов, таких, как «понятие» и «представление». То есть, определение понятия не должно заменяться у учащегося представлением о нем. В логике «понятие» характеризуется определенностью и постоянством, тогда как «представление» можно представить некоторую группу изменчивых воспоминаний об объекте.

4. Для понимания фундаментальных физических законов критерием правильного полного ответа выбрана строгая и полная их математическая запись, и строгая и полная словесная их формулировка (Кр3).

5. Решение физических задач качественно оценивалось посредством критерия Кр4. Значение критерия было максимальным (Кр4=1) при условии, если решение студента представляло собой ряд верных дедуктивных умозаключений, в которых каждое предыдущее заключение является посылкой для следующего.

В таблице 1 представлены результаты критериальной оценки выполнения одного (первого) варианта контрольной работы. В первой части варианта студент отвечал на открытые вопросы по разделам «Физические основы механики» и «Колебания и волны», во второй части – решал типовые физические задачи в общем виде. Мы выполнили критериальную оценку, полагая, что случай полного соответствия выполнения задания учащимся отвечает значению критерия «1», во всех других случаях – «0». Для студентов оценки варьировались по традиционной шкале: от 2 до 5 баллов.

На контрольно-ретроспективном этапе педагогической деятельности мы сделали, как следует из таблицы 1, следующие заключения:

1. Обучающиеся удовлетворительно владеют кодом разделов «Физические основы механики» и «Колебания и волны» (физические величины и понятия), который, в большинстве своем, является базовыми для освоения следующих разделов изучаемой предметной области.

Таблица 1. – Критериальная оценка выполнения заданий контрольной работы

№ задания	Задание 1	Задание 2	Задание 3	Задание 4	Задание 5	Задание 6	Задание 7	Задание 8
Критерии оценки выполнения задания	Кр	Кр	Кр1+Кр2	Кр3	Кр3	Кр4	Кр4	Кр4
% получивших максимальное значение критерия (1)	44.4	55.5	66.6	22.2	22.2	66.6	11.1	33.3

2. Учащиеся серьезно затруднены в строгом и полном представлении фундаментальных физических законов.

3. У выполнявших задания удовлетворительно сформировано умение решать типовые физические задачи с выделением логических шагов - простых или сложных категорических силлогизмов.

4. Студенты продемонстрировали семантический уровень понимания, как самый базовый уровень осмысления учебной информации, при котором мышление сфокусировано прежде всего на узнавании знакомых слов и их значений.

Исходя из анализа выполнения студентами первой в семестре контрольной письменной работы, определены стратегии достижения когнитивного (а для некоторых студентов и распремечивающего) понимания [4]. К таким стратегиям мы относим:

1. Создание на основе семантического треугольника системы упражнений для освоения студентом приема определения физической величины. Заметим, что в методике преподавания физики в средней школе определение физической величины относят к сложной задаче и предлагают использовать, как один из путей, обобщенный план ее изучения [5].

2. Разработку логических задач для научения студента определению физических понятий сложного содержания при помощи: рода и видового отличия; указания; сравнения; описания; характеристики; различения.

3. Включение в качестве развивающего элемента ознакомление студента с дедуктивными умозаключениями на примере физического знания, как способа у них развития логического (и физического) мышления.

4. Требование к субъектам учебного процесса в виде присутствия четкого логического структурирования деятельности при эталонном или любом другом решении физических задач на практических занятиях. Следует, по нашему мнению, обращать внимание студента-будущего инженера на необходимость конструктивности, экономичности и ясности мышления как условия эффективного решения ими возникающих в дальнейшем профессиональных задач [6].

Известно, что студенческий возраст является сенситивным периодом для развития основных социогенных потенций человека [7], [8]. Вместе с тем, первокурсники находятся на этапе адаптации, для которого характерны и ломка многих стереотипов, и новый круг общения, и необходимость саморегуляции, и, конечно, отсутствие устойчивых навыков самостоятельной работы. В этих условиях, на наш взгляд, только педагогический такт, направленность преподавателя базовой дисциплины на напряженную и систематическую работу, в том числе и на систематический педагогический контроль, может стать залогом эффективного освоения студентом содержания учебной дисциплины «Физика».

Список литературы

1. Словарь философских терминов / Научная ред. проф. В.Г. Кузнецова. – М.: ИНФРА-М, 2007. – С. 103-113.
2. Никитина Е.С. Семиотика. Курс лекций. Учебное пособие для вузов. – М.: Академический Проект; Трикста, 2006. –С.19-48.
3. Богин Г.И. Обретение способности понимать: Введение в филологическую герменевтику. – Тверь, 2001. – С. 156-180.
4. Богин Г.И. Типология понимания текста : учебное пособие / Г. И. Богин ; М-во высш. и сред. спец. образования РСФСР, Калининский гос. ун-т. Режим доступа: <https://linguistics-online.narod.ru/index/0-242>
5. Методика преподавания физики в 8-10 классах средней школы. Ч.1 / В.П. Орехов, А.В. Усова, И.К. Турышев. – М.: Просвещение, 1980. – С. 12-23.
- Коваленок Т.П. Современное состояние исследований профессиональных и личностных качеств инженеров // Научно-педагогическое обозрение. 2022. Вып. 1 (41). С. 181–191. Режим доступа: <https://journals.rcsi.science/2307-6127/article/view/269120/248090>
7. Ананьев Б.Г. Избранные педагогические труды: В 2 т. Т.1. / Под ред. А.А. Бодалева и др. – М.: 1980. – С. 162-190.
8. Буланова-Топоркова М.В. Педагогика и психология высшей школы: Учебное пособие. – Ростов н/Д: Феникс, 2002. – С. 453-473.

КОНФОРМАЦИИ АДСОРБИРОВАННЫХ МАКРОЦЕПЕЙ НА СОСТАВНЫХ НЕЗАРЯЖЕННЫХ ЯНУС-НАНОЧАСТИЦАХ СФЕРИЧЕСКОЙ И ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Кручинин Н.Ю., д-р физ.-мат. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Рассмотрены нейтральные янус-частицы, образованные из двух составных частей – половин наносфер или наноцилиндров с различными характеристиками поверхностных потенциалов ван-дер-ваальсова типа. Показано, что равновесные конформации адсорбированных полимерных макроцепей образуют осесимметричные структуры для сферических янус-наночастиц

Макромолекулярные цепи, адсорбированные на наночастицах (НЧ) различной формы, представляют собой простейшие композитные конструкции в том числе и функционального предназначения [1-4]. В качестве НЧ могут служить и незаряженные янус-частицы [5-8], составленные из двух полусфер, или полуцилиндров (рис. 1-2) на основе различных материалов. Такие частицы представляют собой анизотропную систему, в силу разных адгезионных свойств внешних поверхностей этих половин и параметров адсорбционных потенциалов. Это обстоятельство определяет специфический характер формирования макроцепной опушки из адсорбированных на НЧ полимерных молекул: с типичной аксиальной симметрией – для двойных полусферических нанокомпозитов (рис. 1а), и с пространственной симметрией полуцилиндра (рис. 2а) – для составного наностержня.

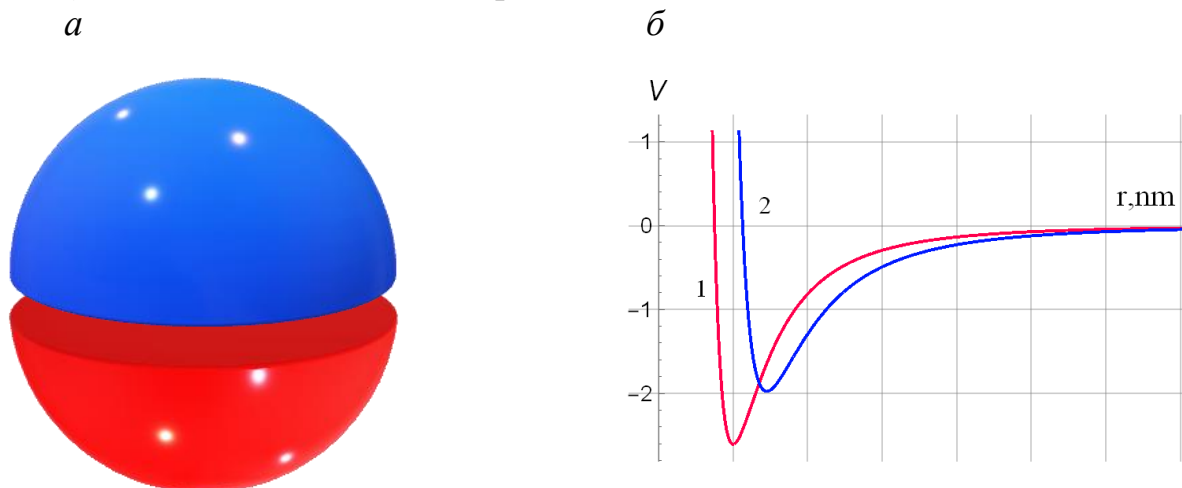


Рис. 1. (а) Композитная составная наночастица из двух полусферических частей из различных материалов создает в наружной приповерхностной области осесимметричное силовое поле.

(б) Радиальные зависимости ван-дер-ваальсовых потенциалов двух полусфер 1 и 2 Янус-НЧ, на основе расчетов по формуле (1)

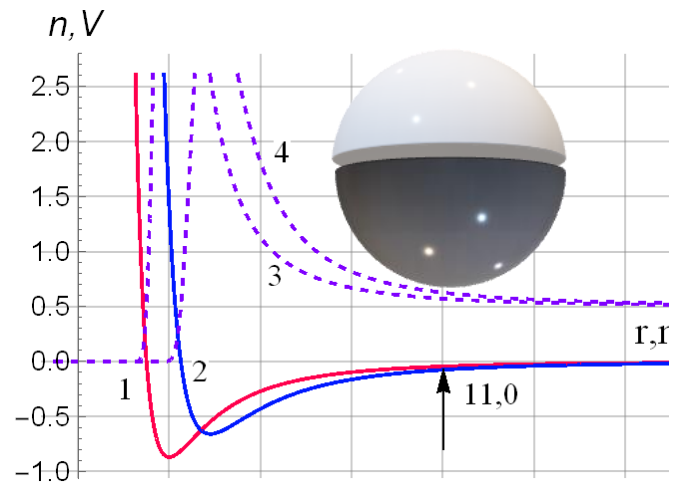
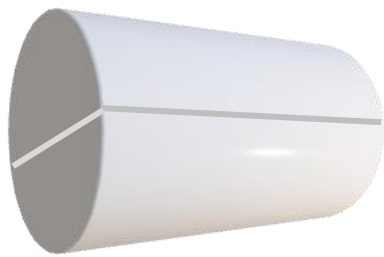


Рис. 2 (а) Составной наностержень, образованный двумя полуцилиндрами из различного материала

(б) 1-2 – Потенциалы $V_{9-3}(r)$ Янус-НЧ; 3-4 – Равновесные (больцмановские) распределения плотности мономеров макроцепи в модели свободных звеньев (пунктир). $R_0 = 10.1$; $a = 0.35$ нм

Янус-сфера

Будем считать, что притяжение полимерной цепи к поверхности незаряженной НЧ осуществляется за счет ван-дер-ваальсовых сил. Потенциальная энергия взаимодействия звена цепи с незаряженной сферической НЧ радиуса R , в случае исходного парного потенциала 6-12 Леннарда-Джонса для межмолекулярного взаимодействия между атомами звена и НЧ ($r > R$), записывается в виде [1]

$$V_{9-3}(r) = -\frac{\pi D n_0 r_m^6}{6r} \left(\frac{r_m^6}{60} \left[\frac{9R-r}{(R-r)^9} - \frac{9R+r}{(R+r)^9} \right] - \left[\frac{3R-r}{(R-r)^3} - \frac{3R+r}{(R+r)^3} \right] \right). \quad (1)$$

Здесь D и r_0 – параметры потенциала 6-12 Леннарда-Джонса, n_0 – концентрация атомов металла сферической НЧ. В силу короткого радиуса действия межмолекулярного потенциала можем считать, что с хорошей точностью формула (1) выполняется и для выпуклой части каждой из полусфер.

Равновесные конфигурации макроцепи в модели, не учитывающей объемные взаимодействия звеньев, задаются конформационной функцией $\psi(\mathbf{r})$, определяющей плотность мономерных субъединиц цепи как $n(\mathbf{r}) = \psi^2(\mathbf{r})$. Функция $\psi(\mathbf{r})$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению [9]

$$\frac{a^2 kT}{6} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = [V(\mathbf{r}) - \varepsilon] \psi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где a – размер звена цепи, kT – тепловая энергия. С целью получения аналитического решения задачи потенциал $V(\mathbf{r})$ в (2) заменяется модельным потенциалом «стенка-дельта-функциональная яма»

$V_{\alpha\delta}^{(1,2)}(r) = V_{\infty}(R) - \alpha_{(1,2)}\delta(r - r_0^{(1,2)})$ [2-4] для каждой из полусфер. После расчета точки минимума r_0 потенциала $V_{9-3}(r)$ в эту точку помещается дельта-функция Дирака. Изменение материала полусферы составной НЧ приводит к смещению точки минимума потенциала (1) и изменению его глубины, эта информация включается в параметры $r_0^{(1,2)}$ и $\alpha_{1,2}$ модельного потенциала $V_{\alpha\delta}^{(1,2)}(r)$.

Найденные нами ранее в [2-3] выражения для радиальных функций $\psi(\mathbf{r}) = F_0^{I,II}(r)$ внутри сферического слоя $R < r < r_0$ опущи у незаряженной сферической наночастицы и в сопряженной с ним области $r > r_0$ могут быть представлены в следующем виде

$$\begin{cases} F_0^I(r) = A_0 \left[\frac{I_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)} \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_0^{II}(r) = A_0 \left[\frac{I_{1/2}(q_0 r_0)}{K_{1/2}(q_0 r_0)} - \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)} \right] \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (3)$$

где $I_{1/2}(q_0 r)$ и $K_{1/2}(q_0 r)$ – модифицированные функции Бесселя первого и второго рода с полуцелым индексом, и собственными значениями $q_0^2 = -\frac{6\varepsilon_0}{a^2 kT}$.

Для янус-сферы распределения (3) будут деформироваться, особенно в области сферического пояса вблизи плоскости раздела полушарий. Собственные значения ε_0 и q_0 определяются из решения трансцендентного уравнения

$$\frac{a^2 kT}{6\alpha r_0} = I_{1/2}(q_0 r_0) K_{1/2}(q_0 r_0) - K_{1/2}^2(q_0 r_0) \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)}, \quad (4)$$

вытекающего из условия сшивки решений ур. (2) в точках действия дельта-функциональных потенциалов $V_{\alpha\delta}^{(1,2)}(r) = V_{\infty}(R) - \alpha_{(1,2)}\delta(r - r_0^{(1,2)})$ каждой из полусфер. Трансверсальная диффузия звеньев цепи с коэффициентом диффузии $a^2 kT / 6$ приводит к размытию радиальных распределений (3) в плоскости раздела, продолженной в толщу макроцепной короны, т.е. в приэкваториальной полосе. Это приводит к зависимости конфигурационных функций $\psi^{(1)}(\mathbf{r}), \psi^{(2)}(\mathbf{r})$ от меридианного угла, с плавным переходом $\psi^{(1)}(\mathbf{r}) \rightarrow \psi^{(2)}(\mathbf{r})$ в поясе раздела.

Уравнение Гросберга-Хохлова (2) с учетом разности радиальных зависимостей $\Delta V_{9-3}(r) = V_{9-3}^{(2)}(r) - V_{9-3}^{(1)}(r)$ потенциалов (1) для полусфер принимает вид

$$\left[\frac{a^2 kT}{6} \nabla_{r,\vartheta}^2 - V_{9-3}^{(1)}(r) - |\varepsilon| \right] \psi(r, \vartheta) = \Delta V_{9-3}(r) \theta(\vartheta - \pi / 2) \psi(r, \vartheta). \quad (5)$$

Здесь в (5) $\theta(\vartheta)$ – единичная функция Хевисайда, введенная для учета «переключения» потенциала (1) при переходе экваториальной плоскости раздела полусфер. Зависимость функции $\psi(\mathbf{r})$ от меридианного угла обеспечивает правая часть уравнения (5), которую можно рассматривать в качестве неоднородности, приближенно осуществив замену $\psi(r, \vartheta) \rightarrow F_0^{I,II}(r)$ справа от знака равенства в (5): $\Delta V_{9-3}(r)\theta(\vartheta - \pi/2)\psi(r, \vartheta) \rightarrow \Delta V_{9-3}(r)\theta(\vartheta - \pi/2)F_0^{I,II}(r)$. Общее решение (5) тогда может быть представлено в виде суперпозиции решений однородного уравнения, определенного формулами (3), и решения уравнения с источником $\Delta V_{9-3}(r)\theta(\vartheta - \pi/2)F_0^{I,II}(r)$, выраженным через трехмерную функцию Грина $G(r, \vartheta; r', \vartheta')$ уравнения Гельмгольца внешней задачи Дирихле для шара

$$\psi(r, \vartheta) = F_0^{I,II}(r) + \int_0^\infty \int_0^\pi \Delta V_{9-3}(r')\theta(\vartheta' - \pi/2)F_0^{I,II}(r')G(r, \vartheta; r', \vartheta')2\pi r'^2 dr' \sin \vartheta' d\vartheta'. \quad (6)$$

$$G(r, \vartheta; r', \vartheta') = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{e^{-\kappa R_{MM'}}}{R_{MM'}} - \frac{1}{\sqrt{rr'}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) K_{n+1/2}(\kappa r) K_{n+1/2}(\kappa r') P_n(\cos \beta) \frac{I_{n+1/2}(\kappa R)}{K_{n+1/2}(\kappa R)} \right\}$$

Расчеты плотности звеньев в модельном потенциале $V_{\alpha\delta}^\infty(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_m)$ выполнялись на основе выражений (3)-(4), а в больцмановском приближении $n(r) \sim \exp[-V_{9-3}(r)/kT]$ – на основе потенциала $V_{9-3}(r)$, определенного выражением (1). Результаты приведены на рисунке 2б.

Янус-цилиндр

Выражение для потенциальной энергии $V_{11-5}(r)$ взаимодействия атома с наноцилиндром радиуса R может быть получено из парных атом-атомных потенциалов 6-12 Леннарда–Джонса. Потенциал бесконечно тонкой (толщиной $\Delta r'$ в один атомарный слой) цилиндрической поверхности радиуса r' был впервые приведен в [1], и может быть записан в виде (n_0 – концентрация атомов наноцилиндра)

$$\begin{aligned}
V_1(r|r') = Dn_0\pi\sqrt{\pi} \left[r_m^{12} \frac{\Gamma(11/2)}{\Gamma(6)} \left((r-r')^{-11} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{11}{2}; 1, -\frac{4rr'}{(r-r')^2}\right) + \right. \right. \\
\left. \left. + (r+r')^{-11} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{11}{2}; 1, \frac{4rr'}{(r+r')^2}\right) \right) - \right. \\
\left. -2r_0^6 \frac{\Gamma(5/2)}{\Gamma(3)} \left((r-r')^{-5} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}; 1, -\frac{4rr'}{(r-r')^2}\right) + \right. \right. \\
\left. \left. + (r+r')^{-5} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}; 1, \frac{4rr'}{(r-r')^2}\right) \right) \right] r' \Delta r'. \tag{7}
\end{aligned}$$

Здесь $F_1(a, b; c, z) \equiv {}_2F_1(a, b; c, z)$ - гипергеометрическая функция

$${}_2F_1(a, b; c, z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!}.$$

Для определения потенциала $V_{11-5}(r)$ результирующего поля, создаваемого однородным сплошным телом в наружной области вне цилиндра достаточно просуммировать потенциалы (7) по радиусам r_i' коаксиальных монослойных цилиндрических поверхностей. В случае композитного януса-наночилиндра (рис. 2а) потенциал поля каждой его половины представляет собой соответствующий потенциал $V_{11-5}(r)$ ван-дер-ваальсова взаимодействия звена цепи с незаряженной цилиндрической поверхностью определенного типа. Показатели 5/2 и 11/2 степенных зависимостей потенциала $V_{11-5}(r)$ от радиуса r , как видно из (7), типичны для цилиндрической формы нанотела.

Радиальные конформационные функции макроцепей в случае их адсорбции на наночилиндре были получены нами ранее в [4], и аналогичны формулам (3), но отличаются от них нулевым значением индекса модифицированных функций Бесселя

$$\begin{aligned}
F_{1,2}^I(r) &= A \left[I_0(q_{1,2}r) - \frac{I_0(q_{1,2}R)}{K_0(q_{1,2}R)} K_0(q_{1,2}r) \right], \quad R < r < r_0 \\
F_{1,2}^{II}(r) &= A \left[\frac{I_0(q_{1,2}r_0)}{K_0(q_{1,2}r_0)} - \frac{I_0(q_{1,2}R)}{K_0(q_{1,2}R)} \right] K_0(q_{1,2}r), \quad r_0 < r < \infty
\end{aligned} \tag{8}$$

Соответственно параметры $q_{1,2}^2 = -\frac{6\varepsilon_{1,2}}{a_{1,2}^2 kT}$ являются корнями двух трансцендентных уравнений

$$\frac{a^2 kT}{6\alpha_{1,2} r_0} = I_0(q_{1,2} r_0) K_0(q_{1,2} r_0) - K_0^2(q_{1,2} r_0) \frac{I_0(q_{1,2} R)}{K_0(q_{1,2} R)}. \quad (9)$$

Проведя рассуждения аналогичные случаю янус-сферы можем построить приближенное решение для макроцепных конформаций на янус-цилиндре в виде, подобном (6)

$$\psi(r, \varphi) = F_{1,2}^{I,II}(r) + \int_R^\infty \int_0^{2\pi} \Delta V_{11-5}(r') \theta(\varphi' - \pi) F_{1,2}^{I,II}(r') G_2(r, \varphi; r', \varphi') r' dr' d\varphi'. \quad (10)$$

Однако теперь в (10) фигурирует функция Грина $G_2(r, \varphi; r', \varphi')$ уравнения Гельмгольца внешней задачи Дирихле для круга

$$G(r, \varphi; r', \varphi') = \frac{1}{2\pi} \left\{ K_0(\kappa \rho) - \frac{I_0(\kappa R)}{K_0(\kappa R)} K_0(\kappa r) K_0(\kappa r') - \right. \\ \left. - 2 \sum_{n=1}^{\infty} K_n(\kappa r) K_n(\kappa r') \cos n(\varphi - \varphi') \frac{I_n(\kappa R)}{K_n(\kappa R)} \right\}, \quad \rho = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\varphi - \varphi')} \quad (11)$$

Молекулярно-динамическое моделирование конформаций полиаланина на поверхности сферической янус-наночастицы

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование макромолекул полиаланина длиной 500 звеньев на поверхности янус-наночастиц сферической формы радиусом около 3 нм производилось с использованием программного комплекса NAMD 2.14 [10] (силовое поле CHARMM [11]). Модель янус-наночастицы состояла из двух полусфер, полученных путем вырезания из кристалла золота, платины и диоксида кремния. Были рассмотрены два типа янус-наночастиц: золото-платина (Au-Pt) и золото-диоксид кремния (Au-SiO₂).

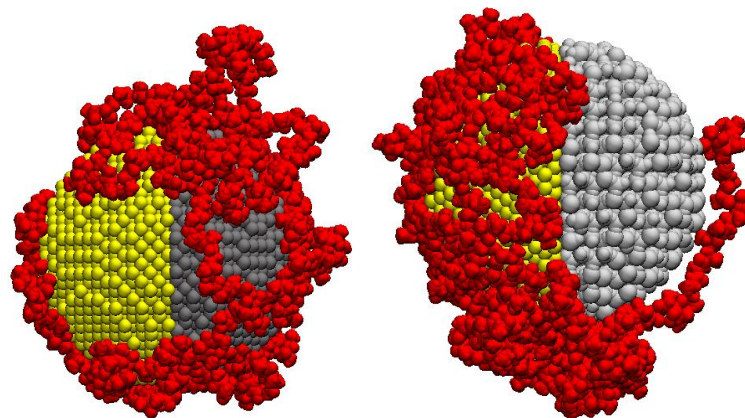


Рис. 3. Полиаланин на поверхности янус-наночастиц Au-Pt (а) и Au-SiO₂ (б) после МД-моделирования (красным цветом изображена макроцепь, желтым – золото, темно серым – платина, светло серым - диоксид кремния).

Взаимодействие с янус-наночастицей описывалось потенциалом Леннард-Джонса, причем наибольшую глубину потенциальной ямы имели атомы платины, наиболее слабое взаимодействие было с поверхностью диоксида кремния, а глубина потенциальной ямы для золота занимала промежуточное значение. Вся молекулярная система была помещена в куб, заполненный молекулами воды. Были рассмотрены по три различных стартовых конформаций каждой из комбинаций полипептида и янус-наночастиц. В результате проведенного молекулярно-динамического моделирования полиаланина на поверхности янус-наночастиц «золото-платина» и «золото-диоксид кремния» установлено, что адсорбция макромолекулярной цепи происходила преимущественно на той половине наночастицы, где Ван-дер-Ваальсово притяжение было более сильным.

На рисунках 3а и 3б видно, что макромолекулярная цепь адсорбировалась в большей мере на правой платиновой стороне янус-наночастицы Au-Pt, так как глубина потенциальной ямы для атомов платины значительно больше, чем для атомов золота. А на рисунке 3б видно, что практически все звенья полиаланина адсорбировались на левой золотой половине наночастицы, а поверхность диоксида кремния практически свободна, что связано со значительно более сильным Ван-дер-Ваальсовым притяжением к золотой поверхности по сравнению с поверхностью диоксида кремния.

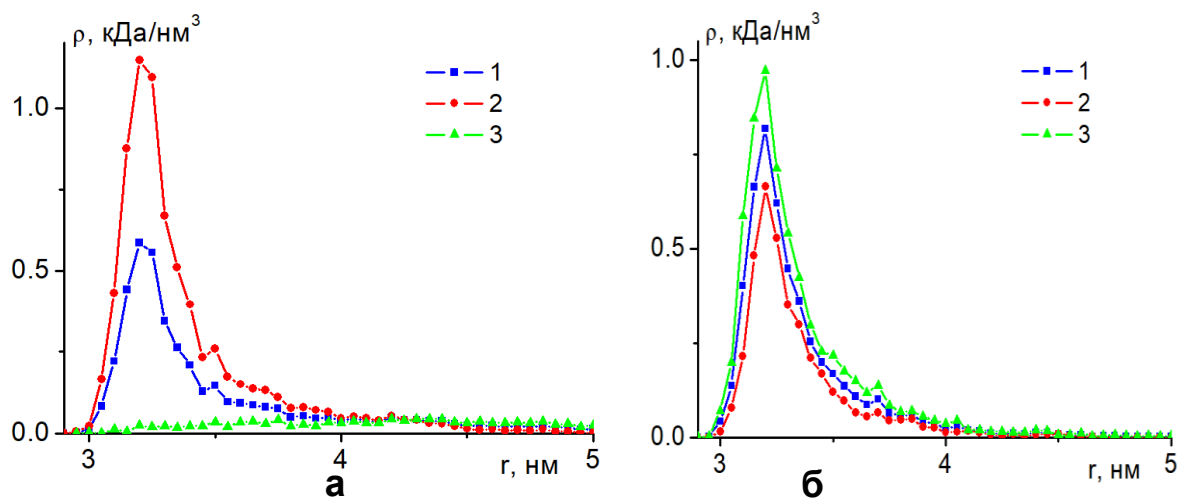


Рис. 4. Радиальные зависимости средней плотности атомов полиаланина на поверхности янус-наночастиц Au-Pt (а) и Au-SiO₂ (б) (1- по всей поверхности наночастицы, 2 – на золотой половине наночастицы, 3 – на поверхности платины или диоксида кремния).

На рисунке 4 изображены радиальные зависимости средней плотности атомов полиаланина на поверхности янус-наночастиц «золото-платина» и «золото-диоксид кремния». На рисунке 4а видно, что кривая радиального распределения на платиновой половине наночастицы Au-Pt наиболее высокая, а на золотой половине пик радиального распределения плотности атомов макроцепи значительно ниже. Еще более сильное различие наблюдается для Au-SiO₂ наночастицы (рис. 4б): у поверхности диоксида кремния плотность

атомов полимера очень низкая, а величина пика радиального распределения плотности атомов полиаланина на золотой половине Au-SiO₂ наночастицы значительно превышает таковую на платиновой половине Au-Pt наночастицы.

Таким образом, в результате реализации специальной аналитической модели и проведенного МД-моделирования обнаружено образование несимметричной относительно плоскости разделения янус-наночастицы макромолекулярной опушки. Та половина янус-наночастицы, которая имела более глубокую потенциальную яму, становилась преимущественной для адсорбции макроцепи вплоть до оголения другой половины наночастицы.

Исследование выполнено при поддержке грантом на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технического развития № 075-15-2024-550.

Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Размещение звеньев полимерной цепи в поле гладкой твердой поверхности и в нанополостях пористого сорбента // Вестник ОГУ. 2008.-№9. -С. 177-184.

2. 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.

DOI: [10.31857/S0207401X23050059](https://doi.org/10.31857/S0207401X23050059), EDN: GDFCWH

3. Кучеренко М.Г., Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения структуры адсорбированных цепей полиэлектролитов на заряженной поверхности сферической наночастицы // Химия высоких энергий. 2025. Т. 59. № 6. С. 440-450.

4. Кучеренко М.Г., Русинов А.П., Чмерева Т.М., Кислов Д.А., Игнатьев А.А., Кручинин Н.Ю. Кинетика фотореакций в регулярной пористой наноструктуре с цилиндрическими ячейками, заполненными активаторсодержащими макромолекулами // Оптика и спектроскопия. 2009. Т.107. №3. С. 510-516

5. Sua H., Hurd Priceb C.-A., Jingb L., Tianb Q., Liub J., Qian K. Janus particles: design, preparation, and biomedical applications Materials Today Bio. 2019. 4. 100033 www.journals.elsevier.com/materials-today-bio

6. Andreas Walther, Axel H. E. Müller Janus Particles: Synthesis, Self-Assembly, Physical Properties and Applications // Chemical Reviews. 2013. -Vol . 113. Issue 7.

7. Jing Hu, Shuxue Zhou, Yangyi Sun, Xiaosheng Fanga and Limin Wu Fabrication, properties and applications of Janus particles // Chemical Society Reviews. 2012.- Issue 11.

8. Marco Lattuada, T. Alan Hatton Synthesis, properties and applications of Janus nanoparticles // Nano Today. 2011.-Vol. 6. Issue 3. P. 286-308.

9. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989.

10. *Phillips J.C., Braun R., Wang W. et al. // J. Comput. Chem. 2005. V. 26. P. 1781-1802.*
11. *MacKerell A.D. Jr., Bashford D., Bellott M. et al. // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102. P. 3586-3616.*

ПЛАЗМОННОЕ УСИЛЕНИЕ КРОСС-АННИГИЛЯЦИОННОЙ ЗАМЕДЛЕННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ С УЧАСТИЕМ МОЛЕКУЛ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА В ОПУШКЕ АДСОРБИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПИ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗАРЯЖЕННОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

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: в композитной наносистеме, состоящей из заряженной сферической плазмонной наночастицы и адсорбированной на ней полимерной цепи с закрепленными на ее звеньях электронно-возбужденными триплетными органическими молекулами рассмотрен процесс кросс-аннигиляции триплетных центров с участием молекул синглетного кислорода. Показано влияние заряда наночастицы на радиально-неоднородное распределение фрагментов полимерной цепи и, как следствие, реагентов фотореакции. Учтено влияние заряженной плазмонной наночастицы на процессы излучательной и безызлучательной дезактивации электронно-возбужденных состояний молекул красителя и кинетику кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции.

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

Перспективным подходом для изменения функциональных свойств наночастиц является добавление к ним макромолекулярного окружения – «полимерной опушки». Полимерная опушка влияет на эффективный размер такой системы, ее устойчивость в растворе, способность взаимодействовать с белками, мембранами клеток и иммунными компонентами организма. Такие композитные наночастицы обладают повышенной растворимостью в воде, сниженным агрегативным поведением и уменьшенной токсичностью [1-2]. Композитные структуры на основе наночастиц с полимерной опушкой находят широкое применение в медицинской диагностике и визуализации тканей, адресной доставке лекарств и разработке новых типов вакцин. Полимерное окружение играет важную роль в улучшении стабильности, растворимости и биосовместимости наночастиц, оно обеспечивает возможность контролируемого высвобождения активных веществ и специфического взаимодействия с биологическими системами, что определяет широкий спектр приложений таких структур в биологии, медицине и нанотехнологиях [2-3].

В этом плане, в качестве одной из наиболее перспективных биополимерных молекул многими научными коллективами рассматриваются макромолекулы хитозана [4-6]. Хитозан является природным полимером, обладающим общим положительным зарядом благодаря аминогруппам в

структуре макроцепи, вследствие этого он вступает в зарядовое взаимодействие с отрицательно заряженными частицами и молекулами, образуя связанные состояния. (В частности, с отрицательно заряженными в нейтральном растворе молекулами органического красителя эритрозина и антибиотика ванкомицина, а также наночастицами Au и Ag синтезированными цитратным методом).

Так, в работе [7] отмечается перспективность использования хитозановых наносистем в задачах доставки терапевтических агентов, тканевой инженерии, заживлении ран и пр. с учетом его хорошей биосовместимости, биоразлагаемости и низкого иммунного ответа. Авторами [8] предложена биологически активная композиция хитозан–наночастицы селена отличающаяся высокой биосовместимостью. Адресная доставка медицинских препаратов аналогичными системами обсуждается в работах [9-11], при этом в статье [11] эффективность доставки препарата ванкомицина предлагается контролировать по люминесцентному отклику квантовых наночастиц. В последнем случае хорошей альтернативой квантовым точкам могут выступать молекулы органических красителей вследствие их существенно большего, в ряде случаев, квантового выхода люминесценции.

Наносистемы на основе комплексов хитозана являются перспективными для приложений нанофотоники, так авторами [12] рассматривается реализация хаотического лазера (random laser) в активной среде органического красителя с добавлением наночастиц золота и серебра с хитозановой оболочкой. Для таких систем важен учет влияния плазмонных наночастиц на процессы излучательной и безызлучательной дезактивации электронно-возбужденных состояний молекул красителя [13-16]. При этом, в большинстве работ обсуждаются моноцентровые процессы, а, например, влиянию плазмонных наночастиц на кросс-аннигиляционную люминесценцию внимание практически не уделяется.

Так как одним из эффективных механизмов связи в обсуждаемых композитных наносистемах является электростатическое взаимодействие, то изменение заряда наночастицы, например за счет варьирования рН раствора, существенно влияет на пространственное распределение адсорбированных полимерных звеньев [17-18]. Ранее нами в статье [19] было показано, что в случае, когда звенья полимерной цепи выступают в качестве агрегатов для триплетных молекул сенсбилизатора и рассматриваемая система предполагается кислородопроницаемой, кинетика кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции Т-центров становится чувствительной к заряду наночастицы. В данной работе рассматриваются аналогичные процессы, но с учетом влияния плазмонной наночастицы на процессы излучательной и безызлучательной дезактивации электронно-возбужденных состояний молекул красителя.

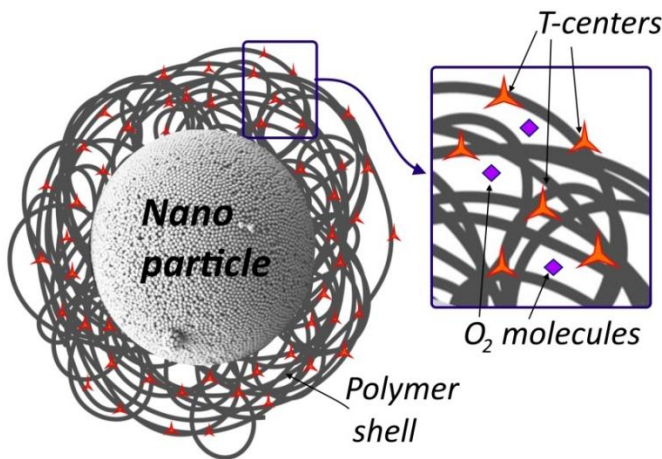


Рисунок – 1 Система «Наночастица-адсорбированная полимерная цепь - Т-центры-молекулярный кислород»

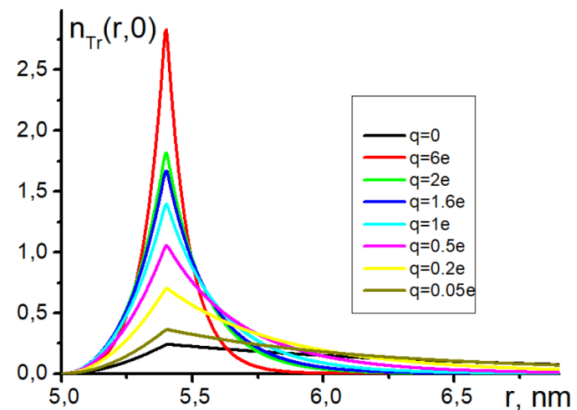


Рисунок 2 – Начальное распределение триплетных центров при различном заряде НЧ [19]

В работе [19] показано (рис. 2), что начальное пространственное распределение триплетных центров связанных со звеньями полимерной цепи существенно зависит от заряда наночастицы. Далее рассматриваются процессы кросс-аннигиляции триплетных центров с участием молекул O_2 , вследствие чего в системе формируется неоднородное пространственное распределение синглетного кислорода $n_{\Delta}(r,t)$, а концентрация триплетных центров $n_T(r,t)$ квазиэкспоненциально уменьшается.

На рисунках 3а-3б приведены расчёты пространственно-временного распределения молекул синглетного кислорода около заряженной ($q=1e$) наночастицы. Как видно из графиков одним из важных параметров модели выступает коэффициент мезодиффузии молекул кислорода D_{Δ} .

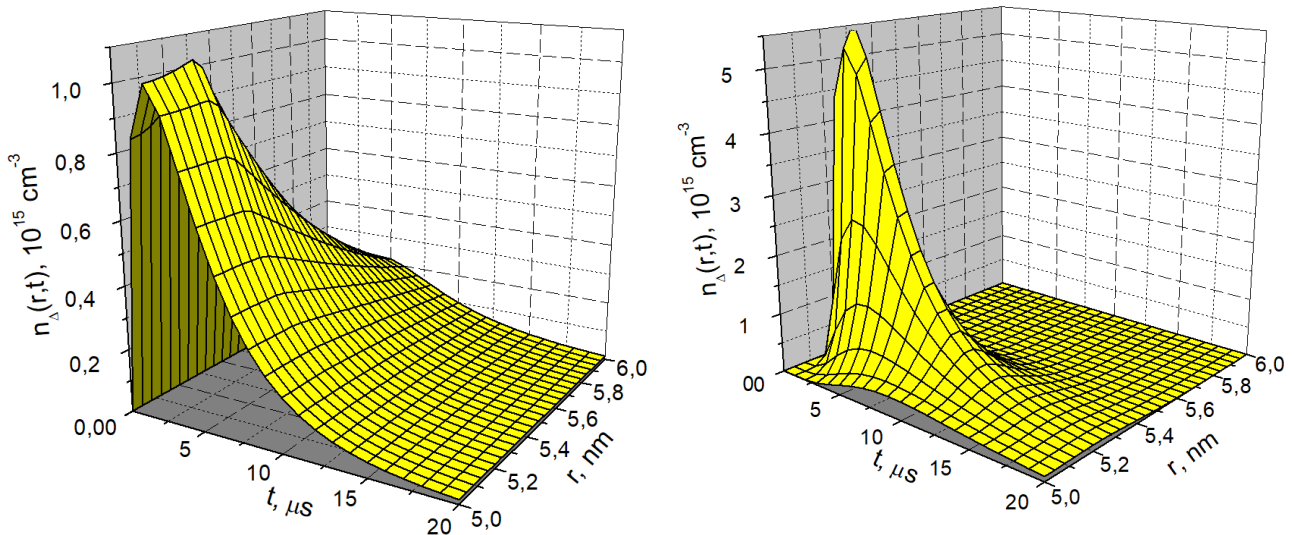


Рисунок 3 –Пространственно-временное распределение молекул синглетного кислорода около заряженной ($q=1e$) наночастицы при различных коэффициентах мезодиффузии $10^{-7} \text{ см}^{-2}/\text{с}$ (слева), $10^{-9} \text{ см}^{-2}/\text{с}$ (справа)

Так при значении $D_{\Delta}=10^{-7}$ см⁻²/с пространственное распределение сглажено за счет диффузионных потоков молекул O₂ к поверхности частицы на периферию полимерной опушки, а амплитуда распределения уменьшается за счет ухода части молекул из системы. При затрудненной диффузии молекул O₂ в полимерном окружении пространственное распределение практически повторяет распределение триплетных центров, диффузионные потоки к поверхности частицы на периферию полимерной опушки незначительны, а амплитуда распределения в несколько раз выше.

Процесс кросс-аннигиляции молекулярных возбуждений сопровождается замедленной флуоресценцией сенсibilизатора. 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 O₂ и радиационного фактора $N(\omega|r)$, трансформированного плазмонным полем сферической НЧ

$$I_{DF}^{T\Delta}(t|\omega) \sim K_{\Delta}(t) \int_R^{\infty} n_T(r,t)n_{\Delta}(r,t)N(\omega|r)4\pi r^2 dr. \quad (1)$$

Экспериментально измеряемой характеристикой светового сигнала – стационарной люминесценции, является спектральная плотность числа фотонов, испущенных молекулой на частоте ω , входящая в качестве множителя в (1), которая при выбранной скоростной нормировке определяется выражением [16, 20-21]

$$N(\omega|\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \frac{w_{sp}(\omega|\mathbf{r})\Gamma^2(\omega|\mathbf{r})}{(\omega - \omega_{if})^2 + \Gamma^2(\omega|\mathbf{r})} \eta(\omega|\mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\eta(\omega|\mathbf{r}) = w_{sp}(\omega|\mathbf{r})/\Gamma(\omega|\mathbf{r})$ – квантовый выход люминесценции; $\Gamma(\omega|\mathbf{r})$ – полуширина спектральной полосы молекулярной люминесценции: $\Gamma(\omega|\mathbf{r}) = w_{sp}(\omega|\mathbf{r}) + U(\omega|r) + K$, $K = \text{const}$. Выражение для скорости $w_{sp}(\omega|r)$ спонтанной эмиссии молекулы красителя, расположенной вблизи наночастицы на расстоянии r от ее центра, может быть записано в следующем виде [16, 20]

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

где $\alpha(\omega)$ – дипольная поляризуемость наночастицы; $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ – тензорная функция Грина $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-3} \left[3(\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) / r^2 - \tilde{\mathbf{I}} \right]$ квазистатического поля дипольного источника; $\tilde{\mathbf{I}}$ – единичный тензор, \mathbf{p}_M – вектор электронного дипольного момента перехода в молекуле.

Скорость тушения возбужденного синглетного состояния молекулы композитной сферической наночастицей с электрической дипольной динамической поляризуемостью $\alpha_e(\omega)$, центр которой расположен на расстоянии r от молекулы, определяется выражением [21]

$$U(\omega|r) = \frac{\mathbf{P}_M^2}{2\hbar\epsilon_m r^6} (1 + 3\cos^2 \theta) \text{Im}(\alpha_e(\omega)). \quad (4)$$

где ϵ_m – диэлектрическая проницаемость внешней среды.

Оригинальная формула для наблюдаемой скорости $w_{DF}(\omega) \sim dn_s / dt$ испускания квантов замедленной флуоресценции, возникающей в результате аннигиляции двух электронных молекулярных возбуждений T и ${}^1\Delta_g$ вблизи плазмонной наночастицы записывается в виде комбинации выражения (2) и скорости $K_{T\Delta} n_T(r,t) n_{\Delta}(r,t)$ генерации возбужденных синглетных состояний молекул в акте T - ${}^1\Delta_g$ кросс-аннигиляции:

$$\begin{aligned} w_{DF}(r|\omega) &= K_{T\Delta} n_T(r,t) n_{\Delta}(r,t) N(\omega) / \Gamma(\omega) = \\ &= K_{T\Delta} n_T(r,t) n_{\Delta}(r,t) \frac{1}{2\pi} \frac{w_{sp}(\omega) \Gamma(\omega)}{(\omega - \omega_{if})^2 + \Gamma^2(\omega)} \eta(\omega). \end{aligned} \quad (5)$$

где n_{Δ} – концентрация синглет-возбужденных молекул, возникающих в акте T - ${}^1\Delta_g$ кросс-аннигиляции; $\omega_{if} \sim 10^{15} \text{с}^{-1}$ – резонансная частота излучательного перехода $i \rightarrow f$ в молекуле красителя.

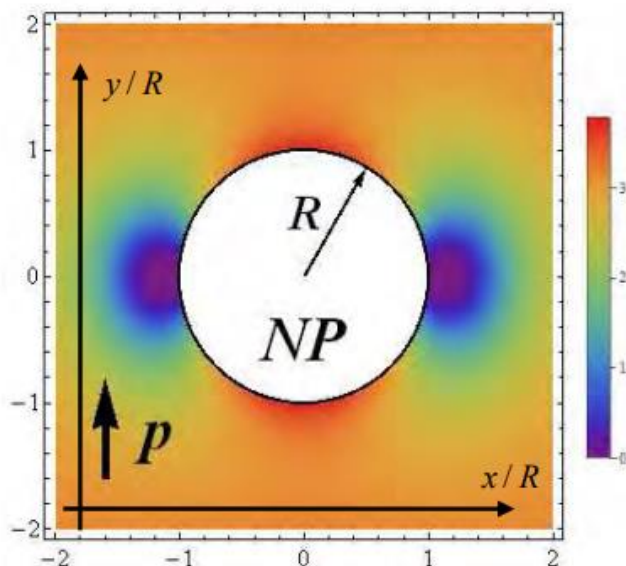


Рисунок 4 – Пространственная зависимость логарифма спектральной плотности числа испущенных фотонов на резонансной частоте ω_{if} [16]

Расчеты спектральной плотности числа испущенных фотонов для молекулы красителя показывают, что вблизи наночастицы зависимость немонотонна: она максимальна, когда наночастица расположена на продолжении вектора дипольного момента и минимальна, когда радиус-вектор \mathbf{r} нормален вектору \mathbf{p} . Так как рассматриваемая в данной работе система «наночастица-полимер» сферически симметрична, то радиационный фактор $N(\omega|r)$, входящий в выражение (1), получается усреднением формулы (2) по

всем угловым конфигурациям. Так как максимум излучения молекулы соответствует частоте перехода ω_{if} , то при качественной оценке усредненной пространственной зависимости радиационного фактора можно в выражении (1) использовать $N_{Aver}(r) = N(\omega_{if} | r)$.

Из выражения (2) видно, что радиальная зависимость радиационного фактора определяется соотношением эффективности процессов плазмонного усиления скорости излучательных переходов в молекуле и безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения молекулы на наночастицу. При этом, как следует из выражения (4), последний процесс наиболее эффективен на небольших расстояниях от поверхности наночастицы, тогда как плазмонное усиление проявляет себя на больших расстояниях. На рисунке 5 показаны несколько соотношений между $w_{sp}(\omega | r)$ и $U(\omega | r)$, приводящих к разным результатам воздействия наночастицы на излучающие молекулы. Так, зависимость 1 построена для случая более эффективного плазмонного усиления свечения (по сравнению с тушением), но в этом случае пространственная область, в которой усиливается люминесцентный сигнал, включает в себя практически всю полимерную опущку, и ее модификация практически не отражается на результирующем сигнале. Кривая 2 отвечает преимущественному тушению, в этом случае компактизация полимерной оболочки приводит к преимущественному смещению реакционной зоны в область ослабления сигнала. В том случае, когда $w_{sp}(\omega | r)$ и $U(\omega | r)$ являются величинами одного порядка (кривая 3), зависимость $N_{Aver}(r) = N(\omega_{if} | r)$ имеет выраженный максимум и при увеличении заряда наночастицы полимерная оболочка «втягивается» в область усиления люминесцентного сигнала.

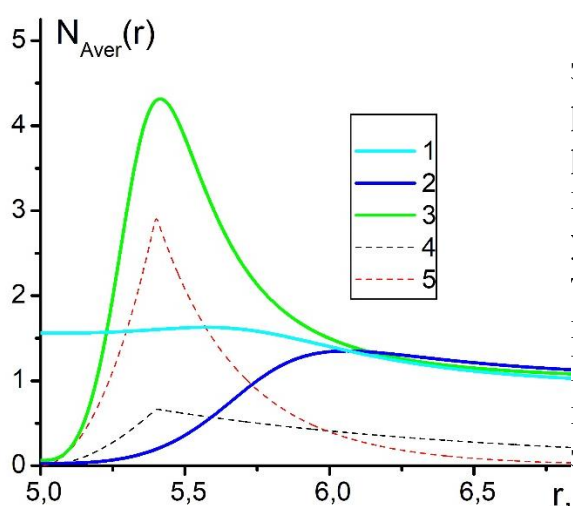


Рисунок 5. Радиальная зависимость усредненного радиационного фактора на резонансной частоте ω_{if} для случая преимущественного плазмонного усиления (1), преимущественного тушения (2) и для случая, когда эти величины одного порядка (3). Начальное распределение триплетных центров для незаряженной (4) и заряженной ($q=0.5e$) наночастицы (5).

Выполнен расчет кинетики сигналов замедленной флуоресценции при различных коэффициентах мезодиффузии кислорода и с учетом различных возможных видов радиальной зависимости усредненного радиационного фактора (рис. 5). Качественный вид сигналов во всех случаях аналогичен, он имеет вид кривой выходящей на максимум, а затем затухающей. При этом, с увеличением заряда на наночастице, амплитуда сигнала возрастает, а его

длительность незначительно уменьшается. Можно выделить два механизма, приводящих к увеличению амплитуды сигналов. Первый из них – концентрационный, связанный с компактизацией полимерной цепи при увеличении заряда наночастицы, вследствие чего и триплетные центры и молекулы синглетного кислорода локализуются в меньшем реакционном объеме с большей концентрацией. Вторым механизмом – плазмонным, связанным с влиянием наночастицы на скорости излучательных и безызлучательных каналов дезактивации электронно-возбужденных молекул.

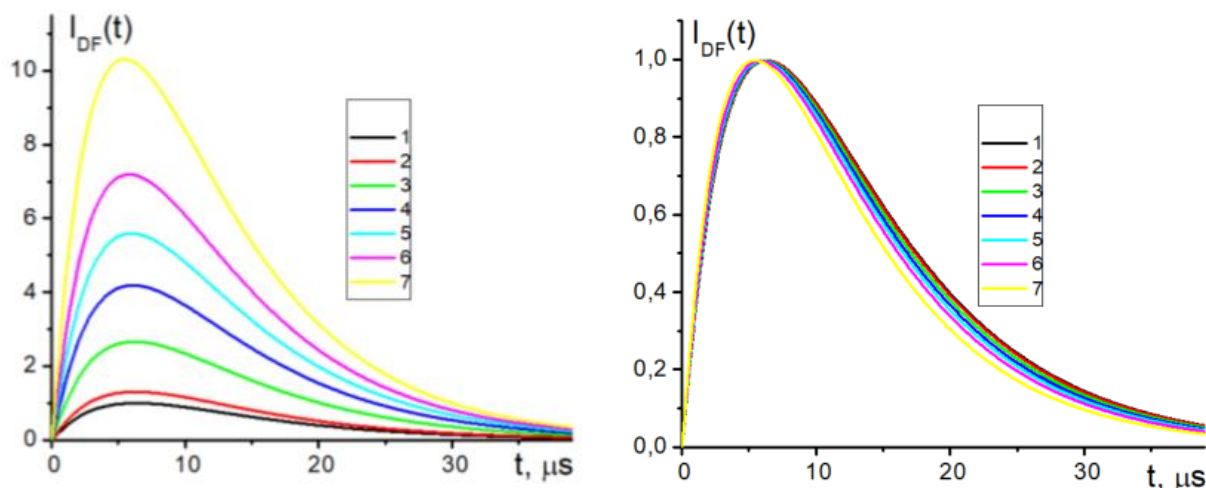


Рисунок 6 – Кинетика сигналов замедленной кросс-аннигиляционной флуоресценции Т-центров в опущенном полимерном слое при различном заряде наночастицы. $q=0$ (1), $q=0.05e$ (2), $q=0.2e$ (3), $q=0.5e$ (4), $q=1e$ (5), $q=2e$ (6), $q=6e$ (7). Справа все те же графики, нормированные на единицу.

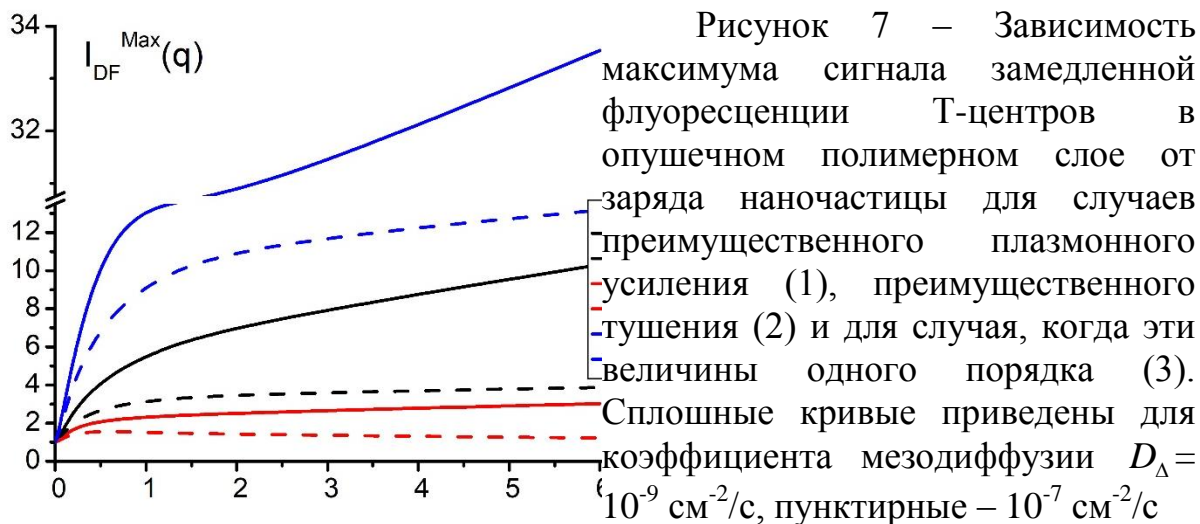


Рисунок 7 – Зависимость максимума сигнала замедленной флуоресценции Т-центров в опущенном полимерном слое от заряда наночастицы для случаев преимущественного плазмонного усиления (1), преимущественного тушения (2) и для случая, когда эти величины одного порядка (3). Сплошные кривые приведены для коэффициента мезодиффузии $D_{\Delta} = 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$, пунктирные – $10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$

Если компактизация полимерной цепи происходит в области усиления люминесцентного сигнала (кривая 3 на рис. 5), то оба эти механизма ведут к повышению амплитуды замедленной флуоресценции (усиление 12-30 раз, рис. 7). Когда вблизи поверхности превалирует безызлучательный канал дезактивации (кривая 2 на рис. 5), то механизмы имеют различные знаки, компактизация цепи увеличивает амплитуду сигналов, а плазмонный механизм

ее уменьшает (усиление в 1.5-2 раза и не монотонность зависимости, рис. 7). Для радиальной зависимости радиационного фактора отвечающей кривой 1 на рис. 5, вклад плазмонного механизма незначителен, рост амплитуды сигнала свечения определяется в основном концентрационным механизмом (усиление в 4-8 раз).

Исследование выполнено при поддержке гранта на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технического развития № 075-15-2024-550.

Список литературы

1. Arshad M., Ali A., Rehman U., Khan M.I., Lee Y.K. Polymer-coated nanoparticles: synthesis strategies, properties, and biomedical applications // *Progress in Polymer Science*, vol. 103, article ID 101223, 2020.
2. Jones J.R., Phillips K.P. Nanoparticle surface functionalization via polymer brushes: recent advances and future challenges // *Chemical Society Reviews*, vol. 48, issue 13, pp. 3738-3763, 2019.
3. Rahimi M., Hosseini M., Farokhi M., Mohammadpour N. Polymer-based nanocarriers for drug delivery systems: current trends and future perspectives // *Pharmaceutical Research*, vol. 38, issue 3, pp. 651-667, 2021.
4. Liu Y., Li X., Zhang Q., Chen J., Wang Z., Zhang W., Zhou L., Yu B. Fabrication and characterization of chitosan-silver nanoparticles composite films with enhanced antibacterial activity. *Materials Science & Engineering C*, vol. 128, pp. 112526, 2021.
5. Hussain M.A., Khan I.U., Abbasi F., Ahmad I., Aftab M.N. Antimicrobial properties and cytotoxicity assessment of silver nanoparticles stabilized by chitosan. *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 615, pp. 213-221, 2022.
6. Silva D.F., Costa P.S., Rodrigues L.C., Alves N.J., Fernandes E.H. Chitosan/silver nanoparticle composites for tissue engineering applications: a review on their preparation methods, physicochemical characteristics, biological activities, and clinical potential. *Biomaterials Science*, vol. 11, no. 10, pp. 3119-3141, 2023.
7. Marpu S.B., Benton E.N. Shining Light on Chitosan: A Review on the Usage of Chitosan for Photonics and Nanomaterials Research. *Int J Mol Sci*. 2018 Jun 17;19(6):1795. doi: 10.3390/ijms19061795. PMID: 29914214.
8. Апрятина К.В., Мурач Е.И., Амарантов С.В., Ерлыкина Е.И. и др. Синтез биологически активной композиции хитозан-наночастицы селена // *Прикладная биохимия и микробиология*, 2022, том 58, № 2, с. 140–145. DOI: 10.31857/S0555109922020027.
9. Попова Е.В., Тихомирова В.Е., Безнос О.В., Григорьев Ю.В., и др. Хитозановые наночастицы — система доставки лекарств в передний отдел глаза // *Вестник Московского университета. Серия 2: Химическая*. Т. 64, № 2, 2023, С. 141–151.
10. Felt O., Furrer P., Mayer J.M., Plazonnet B., Buri P., Gurny R. Topical use of chitosan in ophthalmology: tolerance assessment and evaluation of precorneal

retention. *International Journal of Pharmaceutics* // Volume 180, Issue 2, 15 April 1999, Pages 185-193. [https://doi.org/10.1016/S0378-5173\(99\)00003-4](https://doi.org/10.1016/S0378-5173(99)00003-4).

11. С.В. Шилова, Г.М. Миргалеев, Д.О. Сагдеев, Ю.Г. Галяметдинов, Люминесцентные наночастицы полиэлектролитного комплекса хитозана с каррагинаном как перспективные многофункциональные системы доставки ванкомицина / *Коллоидный журнал*. 2025, т.87, в.5, с.575-590. DOI: <https://doi.org/10.7868/S3034543X25050077>.

12. Haddawi S.F., Sadrolhosseini A.R., Ejbarah R.A., Hamidi S.M., Kazemzad M. Chitosan-C3N4- Plasmonic Nanocomposite as a Generation of Scatterer Points for Random Laser Application. *Plasmonics*, iss. 20, pp. 7183–7193, 2025. <https://doi.org/10.1007/s11468-02-02724-4>.

13. Кучеренко М.Г., Русинов А.П. Влияние металлической наночастицы на процессы дезактивации электронно-возбужденного состояния молекулы // *Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием)*, - Оренбург, 2015. - С. 1091-1096.

14. Lebedev O.V. Enhancement of fluorescence emission from organic molecules adsorbed onto metal nanoparticles // *RSC Advances*, vol. 8, iss. 12, pp. 6783-6792, 2018.

15. Xu X., Han G., Guo Z. Metal nanoparticles-mediated enhancement of luminescence from organic dyes // *Nanotechnology*, vol. 30, iss. 40, art. № 40LT01, 2019.

16. Pan J., Shen Y., Wang H., Yang H. Fluorescent sensors based on dye-modified gold nanoparticles for bioanalytical applications. *ACS Applied Nano Materials*, vol. 3, iss. 10, pp. 9681-9691, 2020.

17. Кучеренко М. Г., Неясов П. П., Кручинин Н. Ю. Моделирование конформационных перестроек макромолекулы, адсорбированной на поверхности металлической нано-частицы, во внешнем эл. поле // *Химическая физика*, 2023, том 42, № 5, с. 1–10.

18. 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.

19. Кучеренко М.Г., Русинов А.П. Кросс-аннигиляция молекул синглетного кислорода с триплетными центрами полиамфолитной цепи на заряженной металлической наночастице // *Наука и образование: фундаментальные основы, технологии, инновации посвященная 70-летию ОГУ : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием)*, - Оренбург, 2025. 7 с.

20. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.IV. Квантовая электродинамика. – М.: Наука. 1989. – 720 с.

21. Кучеренко М.Г. Динамическая поляризуемость наносфера в случае вырожденного электронного газа и ее роль в плазмонном механизме передачи энергии. // *Вестник ОГУ*. – 2012. – №1. – Т.137, – С. 141-149.

УПРАВЛЕНИЕ КОНФОРМАЦИЯМИ АДсорБИРОВАННЫХ МАКРОЦЕПЕЙ НА ЗАРЯЖЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ СОСТАВНОГО ПРОВОДЯЩЕГО НАНОШАРА

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Кручинин Н.Ю., д-р физ.-мат. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Рассмотрена конструкция янус-наночастицы в виде проводящих полусфер с изолирующей прослойкой и различными величинами их зарядов или потенциалов, или единым зарядом и электростатическим потенциалом – в случае гальванической связи этих половин. Определены характеристики поля вне наночастицы, а также угловое распределение плотности заряда на ее поверхности. Произведен расчет радиального распределения плотности звеньев адсорбированной цепи полиэлектролита в рамках больцмановского приближения для модели разорванных звеньев. Произведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование макромолекулы полиэлектролита (AlaAsp)₂₅₀ длиной 500 звеньев на поверхности сферической янус-наночастицы «золото-платина» радиусом около 3 нм с использованием программного комплекса NAMD 2.14

Композитные конструкции в виде макромолекулярных цепей, адсорбированных на наночастицах (НЧ) различной структуры и формы, представляются перспективными функциональными элементами для систем нанoeлектроники, молекулярной фотоники и бионики [1-2]. Электронейтральные в целом, или заряженные проводящие наночастицы, изолированные, или помещенные во внешнее квазистационарное поляризующее электрическое поле имеют одинаковый потенциал u_s всех точек поверхности S . При этом, локальная поверхностная плотность заряда зависит от деталей формы НЧ, а также конфигурации внешнего поляризующего поля. Тогда характеристики поля вблизи поверхности НЧ будут отражать особенности распределения зарядовой плотности $\sigma(r_s)$ и оказывать влияние на формирование макроцепных конформаций заряженных звеньев адсорбированных полимерных молекул, или дипольных моментов сегментов цепей – для полиамфолитов.

Наиболее подробно особенности формирования конформационной структуры молекул полиэлектролитов и полиамфолитов изучены для заряженных и поляризованных сферических и цилиндрических наночастиц-адсорбентов: [1-3]. Однако современные технологии синтеза НЧ позволяют получать и калиброванные композитные частицы более сложного состава и формы. В частности, большой интерес для технических и биомедицинских приложений представляют составные наночастицы биполусферической структуры – так называемые двуликие янус-частицы [4-7]. Отдельные части

составных НЧ изготавливаются из различных материалов – металлов или диэлектриков с выраженными проводящими или магнитными свойствами.

Заряженные сферические янус-частицы с изолирующей прослойкой

Рассмотрим сферическую янус-частицу из двух металлов, с тонкой диэлектрической прослойкой. Заряды полусфер Q_1, Q_2 , соответствующие постоянные потенциалы – V_1, V_2 . При удалении прослойки образуется гальваническая связь между полушариями и тогда $Q_1+Q_2=2Q, V_1=V_2=V$. Уравнение Гроссберга-Хохлова [8] с учетом разности радиальных зависимостей $\Delta V_{9-3}(r) = V_{9-3}^{(2)}(r) - V_{9-3}^{(1)}(r)$ ван-дер-ваальсовых потенциалов полусфер, а также потенциала $V_{Q,\Delta Q}(r, \vartheta)$ электростатического поля вне НЧ имеет вид ($\Delta Q = Q_1 - Q_2$)

(1)

$$\left[\frac{a^2 kT}{6} \nabla_{r,\vartheta}^2 - V_{9-3}^{(1)}(r) - V_Q(r) - |\varepsilon| \right] \psi(r, \vartheta) = [V_{\Delta Q}(r, \vartheta) + \Delta V_{9-3}(r) \theta(\vartheta - \pi/2)] \psi(r, \vartheta).$$

где a – размер звена цепи, kT – тепловая энергия, $V_Q(r) = qQ/r, r > R$.

Потенциальная энергия взаимодействия звена цепи с незаряженной сферической НЧ радиуса R записывается в виде [9]

$$V_{9-3}(r) = -\frac{\pi D n_0 r_m^6}{6r} \left(\frac{r_m^6}{60} \left[\frac{9R-r}{(R-r)^9} - \frac{9R+r}{(R+r)^9} \right] - \left[\frac{3R-r}{(R-r)^3} - \frac{3R+r}{(R+r)^3} \right] \right). \quad (2)$$

Здесь D и r_m – параметры потенциала 6-12 Леннарда-Джонса, n_0 – концентрация атомов металла 1 или 2 для каждой полусферической части НЧ. В отсутствие зарядов $Q_1=0$ и $Q_2=0$, вдали от экваториальной плоскости раздела полушарий янус-НЧ, с хорошей точностью формула (2) выполняется и для выпуклых частей каждой из полусфер. С целью получения аналитического решения задачи сферически симметричная часть потенциала $V(r) = V_{9-3}^{(1)}(r) + V_Q(r)$ в левой части уравнения (1) заменяется модельным потенциалом «стенка – дельта – функциональная яма» $V(r) = V_{\alpha\delta}^{(1,2)}(r) = V_\infty(R) - \alpha_{(1,2)} \delta(r - r_0^{(1,2)})$ [2-4] для каждой из полусфер. После расчета точки минимума r_0 потенциала $V(r) = V_{9-3}^{(1)}(r) + V_Q(r)$ в эту точку помещается дельта-функция Дирака $\delta(r - r_0^{(1,2)})$. Изменение материала полусферы составной НЧ и/или ее заряда Q_1, Q_2 , приводит к смещению точки минимума потенциала $V(r) = V_{9-3}^{(1)}(r) + V_Q(r)$ и изменению глубины потенциальной ямы. Эта информация учитывается в параметрах $r_0^{(1,2)}$ и $\alpha_{1,2}$ модельного потенциала $V_{\alpha\delta}^{(1,2)}(r)$. Потенциал электростатического поля

$V_{Q_1, Q_2}(r, \vartheta)$ вне заряженной янус-наночастицы без учета ван-дер ваальсовых частей $V_{9-3}^{(1)}(r), V_{9-3}^{(2)}(r)$ можно представить в виде

$$\varphi(r, \vartheta) = \frac{Q}{r} + \frac{\Delta Q}{2R} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (4k+3)(2k)!}{2^{2k} k!(k+1)!} \left(\frac{R}{r}\right)^{2(k+1)} P_{2k+1}(\cos \vartheta), \quad (3)$$

где $P_{2k+1}(\cos \vartheta)$ – полином Лежандра степени $2k+1$. Тогда для углового $\sigma(\cos \vartheta)$ заряда на сфере S_R из (3) получаем

$$\sigma(\cos \vartheta) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)_R = \frac{Q}{4\pi R^2} + \frac{\Delta Q}{8\pi R^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (4k+3)(2k)! 2(k+1)}{2^{2k} k!(k+1)!} P_{2k+1}(\cos \vartheta). \quad (4)$$

Распределение поверхностной плотности (4) удобно использовать для расчета характеристик поля НЧ при организации молекулярно-динамического моделирования конформаций макроцепей, адсорбированных на поверхности S_R .

Слагаемое в (3), представленное степенным рядом, определяет потенциальную функцию $q^{-1}V_{\Delta Q}(r, \vartheta)$, фигурирующую в правой части уравнения (1). Приближенное решение уравнения (1) может быть получено методом функций Грина уравнения Гельмгольца, развитым в работе [10]. Обозначив решение уравнения (1) с нулевой правой частью через $\psi_0(r, \vartheta) \rightarrow F_0(r)$, и рассматривая модифицированную правую часть (1) $[V_{\Delta Q}(r, \vartheta) + \Delta V_{9-3}(r)\theta(\vartheta - \pi/2)]F_0(r)$ в качестве функции-источника, общее решение (1) тогда можем представить в виде суперпозиции решения $F_0(r)$ однородного уравнения и решения уравнения с источником $[V_{\Delta Q}(r, \vartheta) + \Delta V_{9-3}(r)\theta(\vartheta - \pi/2)]F_0(r)$, интегрированным с трехмерной функцией Грина $G(r, \vartheta; r', \vartheta')$ уравнения Гельмгольца внешней задачи Дирихле для шара

$$\psi(r, \vartheta) = F_0(r) + \int_R^{\infty} \int_0^{\pi} [V_{\Delta Q}(r', \vartheta') + \Delta V_{9-3}(r')\theta(\vartheta' - \pi/2)] F_0(r') G(r, \vartheta; r', \vartheta') 2\pi r'^2 dr' \sin \vartheta' d\vartheta'. \quad (5)$$

$$G(r, \vartheta; r', \vartheta') = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{e^{-\kappa R_{MM'}}}{R_{MM'}} - \frac{1}{\sqrt{rr'}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) K_{n+1/2}(\kappa r) K_{n+1/2}(\kappa r') P_n(\cos \beta) \frac{I_{n+1/2}(\kappa R)}{K_{n+1/2}(\kappa R)} \right\}$$

Расчеты плотности звеньев цепи могут быть произведены на основе (5), а в более простом варианте больцмановского приближения модели свободных звеньев $n(r, \vartheta) \sim \exp[-V(r, \vartheta)/kT]$, $r > R$ – на основе общего потенциала

$$V(r, \vartheta) = V_{9-3}^{(1)}(r) + V_{9-3}^{(2)}(r) + V_Q(r) + V_{\Delta Q}(r, \vartheta). \quad (6)$$

Анизотропия в распределении плотности звеньев $n(r, \vartheta)$, в отличие от случая, рассмотренного в [10], будет определяться теперь и анизотропным характером потенциала $q^{-1}V_{\Delta Q}(r, \vartheta)$. Именно этот потенциал формирует угловую компоненту $E_g(r, \vartheta)$ вектора напряженности электрического поля $\mathbf{E}(r, \vartheta)$. В случае взаимодействия поля со звеньями цепи полиамфолита, с дипольными моментами \mathbf{d} , энергия этого взаимодействия $V(r, \vartheta) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(r, \vartheta) = -\mathbf{d} \cdot \nabla V_{\Delta Q}(r, \vartheta)q^{-1}$, или $V(r, \vartheta) = -d_r E_r(r, \vartheta) - d_g E_g(r, \vartheta)$. Компоненты вектора напряженности электрического поля $\mathbf{E}(r, \vartheta)$ определяются из формулы (3)

$$E_r(r, \vartheta) = -\left(\frac{\partial \varphi}{\partial r}\right) = \frac{Q}{r^2} + \frac{\Delta Q}{rR} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (4k+3)(2k)!(k+1)}{2^{2k} k!(k+1)!} \left(\frac{R}{r}\right)^{2(k+1)} P_{2k+1}(\cos \vartheta), \quad (7)$$

$$E_g(r, \vartheta) = -\frac{1}{r} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \vartheta}\right) = \frac{\Delta Q}{2rR} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (4k+3)(2k)!}{2^{2k} k!(k+1)!} \left(\frac{R}{r}\right)^{2(k+1)} \frac{d}{d\vartheta} P_{2k+1}(\cos \vartheta). \quad (8)$$

Случай гальванически связанных полушарий

Составному наночастице с единым зарядом Q на поверхности и постоянной зарядовой плотностью σ соответствует более простое уравнение для конформационной функции $\psi(\mathbf{r})$, нежели уравнение (1), поскольку $\Delta Q = Q_1 - Q_2 = 0$, и тогда $V_{\Delta Q}(r, \vartheta) = 0$

$$\left[\frac{a^2 k T}{6} \nabla_{r, \vartheta}^2 - V_{9-3}^{(1)}(r) - V_Q(r) - |\varepsilon| \right] \psi(r, \vartheta) = [\Delta V_{9-3}(r) \theta(\vartheta - \pi/2)] \psi(r, \vartheta). \quad (9)$$

Тогда для каждой из пространственных областей $\Omega_1(r > R, 0 < \vartheta < \pi/2)$ и $\Omega_2(r > R, \pi/2 < \vartheta < \pi)$, сопряженных с соответствующими полусферами 1 и 2, получаем решения, справедливые вдали от плоскости раздела в виде суперпозиции модифицированных функций Бесселя первого $I_\nu(q_0 r)$ и второго $K_\nu(q_0 r)$ рода с индексом $\nu = \sqrt{1/4 - \gamma}$ – величины, отражающей степень взаимодействия заряда НЧ с диполем звена полиамфолита

$$\begin{cases} F_0^I(r) = A \left[\frac{I_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_0^{II}(r) = A \left[\frac{I_\nu(q_0 r_0)}{K_\nu(q_0 r_0)} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \right] \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (10)$$

Уравнение для собственного значения q_0

$$\frac{a^2 kT}{6\alpha r_0} = I_\nu(q_0 r_0) K_\nu(q_0 r_0) - K_\nu^2(q_0 r_0) \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)}. \quad (11)$$

При $\gamma \rightarrow 0$, $\nu = 1/2$ и формулы (3)-(4) переходят в найденные нами ранее выражения для незаряженной сферической наночастицы [1, 10].

Для конформационной функции $\psi(r, \vartheta)$ вместо (5) можем записать

$$\psi(r, \vartheta) = F_0^{I, II}(r) + \int_R^\infty \int_0^\pi \Delta V_{9-3}(r') \theta(\vartheta' - \pi/2) F_0^{I, II}(r') G(r, \vartheta; r', \vartheta') 2\pi r'^2 dr' \sin \vartheta' d\vartheta'$$

где функция Грина $G(r, \vartheta; r', \vartheta')$ – та же, что и в (5).

Расчеты плотности звеньев в модельном потенциале $V_{\alpha\delta}^\infty(r) = V_\infty(R) - \alpha_{1,2} \delta(r - r_0^{(1,2)})$ выполнялись на основе выражений (10)-(11), а в больцмановском приближении $n(r) \sim \exp[-V(r)/kT]$ модели свободных звеньев – на основе потенциала $V(r) = V_{9-3}^{(1,2)}(r) + V_Q(r)$, определенного формулой (2) и $V_Q(r) = qQ/r$, $r > R$. Результаты расчетов приведены на рисунках 1- 2.

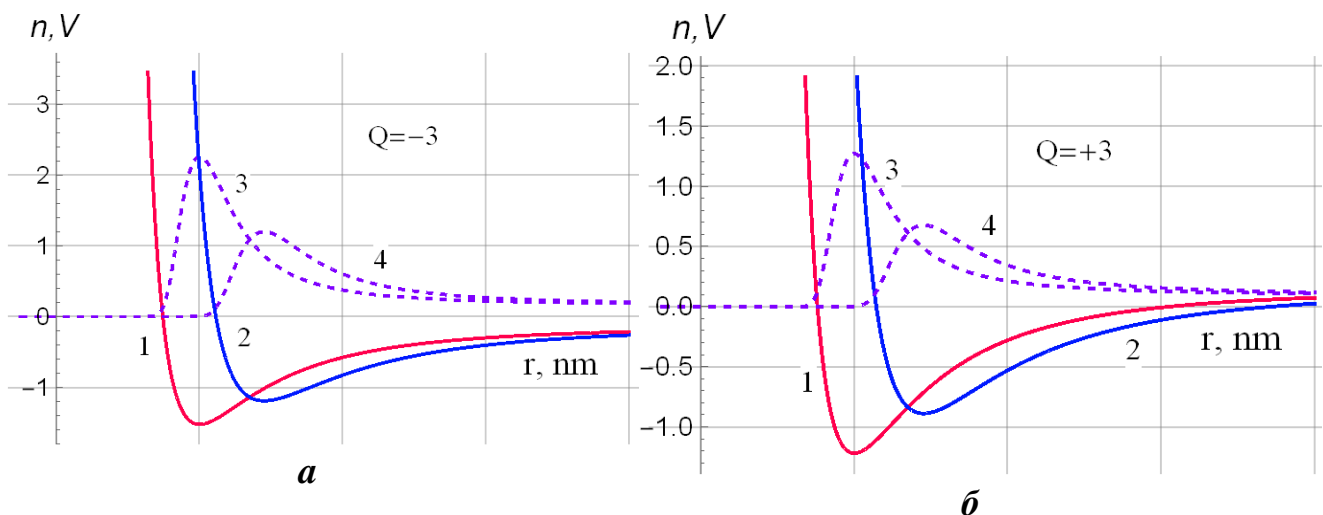


Рис. 1 Радиальные зависимости потенциала $V(r) = V_{9-3}^{(1,2)}(r) + V_Q(r)$ (сплошные кривые 1,2) в диапазоне r от 10.15 до 11.0 нм и радиальные распределения (пунктирные кривые 3,4) звеньев цепи полиэлектролита на поверхности заряженной сферической янус-НЧ при различных знаках ее заряда Q : -3 (а) и +3 (б) в условных единицах. $R=10.1$ нм, $r_m=0.35$ нм.

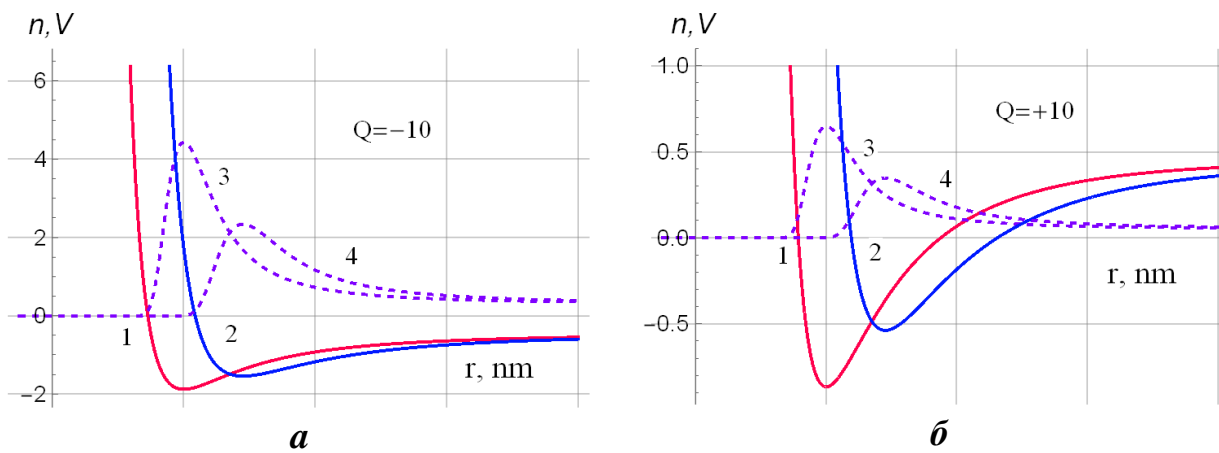


Рис. 2 Радиальные зависимости потенциала $V(r) = V_{9-3}^{(1,2)}(r) + V_Q(r)$ (сплошные кривые 1,2) в диапазоне r от 10.15 до 11.0 нм и радиальные распределения (пунктирные кривые) звеньев цепи полиэлектролита на поверхности заряженной янус-НЧ при различных знаках ее заряда Q : -10 (а) и +10 (б). $R=10.1$ нм, $r_m=0.35$ нм. Больцмановское приближение для плотностей n .

Все графики рис. 1 и 2 приведены в неизменном масштабе, отдельном для потенциала V и для плотности n . Изменение знака единого заряда Q янус-НЧ – с отрицательного на положительный, приводит к разбуханию короны адсорбированной полиэлектролитной цепи, причем с разной эффективностью для полушарий, отличающихся ван-дер-ваальсовыми потенциалами $V_{9-3}^{(1,2)}(r)$. Отказ от больцмановского приближения в расчетах плотности $n(r, \vartheta)$ звеньев макроцепи приводит к необходимости использования выражений (10)-(11) – для случая гальванически связанных полушарий янус-НЧ, и выражений (3)-(5) – для случая НЧ с изолирующей прослойкой и различными зарядами Q_1, Q_2 полушарий.

Молекулярно-динамическое моделирование конформаций полиэлектролита на заряженной сферической янус-наночастице

Было произведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование макромолекулы полиэлектролита $(AlaAsp)_{250}$ длиной 500 звеньев (аминокислотные остатки Asp заряжены отрицательно, а Ala – нейтральные) на поверхности сферической янус-наночастицы «золото-платина» радиусом около 3 нм с использованием программного комплекса NAMD 2.14 [11] (силовое поле CHARMM [12]). Взаимодействие с янус-наночастицей описывалось потенциалом Леннард-Джонса: для атомов золота глубина потенциальной ямы была значительной меньше, чем для атомов платины. Вся молекулярная система была помещена в куб, заполненный молекулами воды. Поверхность наночастицы была нейтральной или положительно заряженной с поверхностной плотностью заряда $\sigma_1 \approx 0.4e/\text{нм}^2$ и $\sigma_2 \approx 1e/\text{нм}^2$ (парциальные заряды атомов на поверхности $0.02e$ и $0.05e$).

В результате молекулярно-динамического моделирования полиэлектролитной макроцепи на поверхности янус-наночастицы «золото-платина» в случае незаряженной (рис. 3а) или слабозаряженной (рис. 3б)

поверхности наблюдалась преимущественная адсорбция полиэлектролита на платиновой половине наночастицы. На незаряженной наночастице (рис. 3а) наблюдались значительные по длине петли полиэлектролита на золотом полушарии и более короткие на платиновой половине, что связано с более сильным Ван-дер-Ваальсовым притяжением к атомам платины. На золотой половине из-за более слабой связи с поверхностью макромолекулярная опушка вследствие межзвенного отталкивания значительно разбухала. По мере увеличения заряда наночастицы на платиновом полушарии вследствие электростатического притяжения к поверхности при достаточно низкой поверхностной плотности заряда почти все звенья макромолекулы располагались на поверхности (рис. 3б), а на золотой половине полиэлектролитная опушка также сжималась, но оставалась достаточно сильно разбухшей. При дальнейшем увеличении поверхностной плотности заряда наночастицы макромолекулярная опушка на золотом полушарии также сжималась и различия в конформационной структуре для обеих половин янус-наночастицы почти исчезали (рис. 3в).

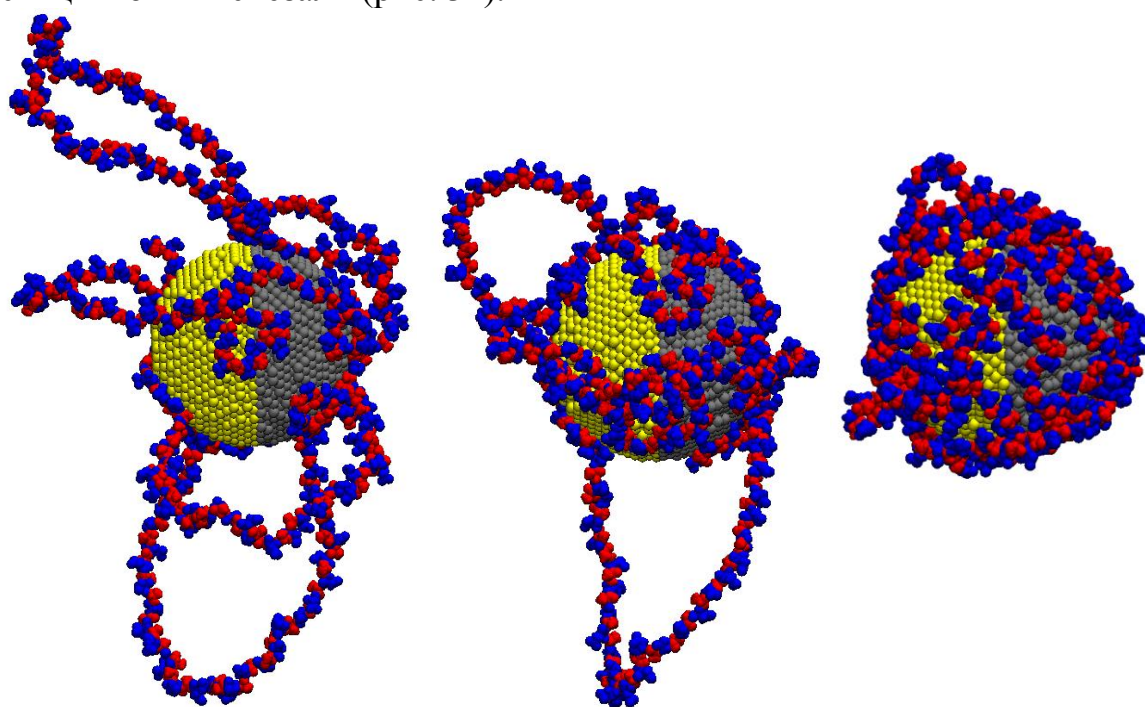


Рис. 3. Полиэлектролит после моделирования на поверхности янус-наночастицы «золото-платина», заряженной с различной с поверхностной плотностью заряда: 0 (а), σ_1 (б) и σ_2 (в) (желтым цветом изображено золото, серым - платина, красным – звенья Ala, а синим - Asp).

Исследование выполнено благодаря поддержке грантом на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технического развития № 075-15-2024-550.

Список литературы

1. 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.

DOI: [10.31857/S0207401X23050059](https://doi.org/10.31857/S0207401X23050059), EDN: GDFCWH

2. Кучеренко М.Г., Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения структуры адсорбированных цепей полиэлектролитов на заряженной поверхности сферической наночаст. // Химия высоких энергий. 2025. Т. 59. № 6. С. 440-450.

3. Кучеренко М.Г., Русинов А.П., Чмерева Т.М., Кислов Д.А., Игнатьев А.А., Кручинин Н.Ю. Кинетика фотореакций в регулярной пористой наноструктуре с цилиндрическими ячейками, заполненными активаторсодержащими макромолекулами // Оптика и спектроскопия. 2009. Т.107. №3. С. 510-516.

4. Marco Lattuada, T. Alan Hatton Synthesis, properties and applications of Janus nanoparticles // Nano Today. 2011.-Vol. 6. Issue 3. P. 286-308.

5. Andreas Walther, Axel H. E. Müller Janus Particles: Synthesis, Self-Assembly, Physical Properties and Applications // Chem. Reviews. 2013. -Vol . 113. Iss. 7.

6. Sua H., Hurd Priceb C.-A., Jingb L., Tianb Q., Liub J., Qian K. Janus particles: design, preparation, and biomedical applications // Materials Today Bio. 2019. 4. 100033 www.journals.elsevier.com/materials-today-bio

7. Jing Hu, Shuxue Zhou, Yangyi Sun, Xiaosheng Fanga and Limin Wu Fabrication, properties and applications of Janus particles // Chemical Society Reviews. 2012.- Issue 11.

8. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989.

9. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Размещение звеньев полимерной цепи в поле гладкой твердой поверхности и в нанополостях пористого сорбента // Вестник ОГУ. 2008.-№9. -С. 177-184.

10. Кучеренко М. Г., Кручинин Н.Ю. Конформации адсорбированных макроцепей на составных незаряженных янус-наночастицах сферической и цилиндрической формы // Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры [Электрон. ресурс]: матер. Всерос. научно-метод. конфер. Оренбург. гос. ун-т.– Оренбург: ОГУ. 2026. Настоящий сборник.

11. Phillips J.C., Braun R., Wang W. et al. // J. Comput. Chem. 2005. V. 26. P. 1781-1802.

12. MacKerell A.D. Jr., Bashford D., Bellott M. et al. // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102. P. 3586-3616.

ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМОННОГО УПРАВЛЕНИЯ СКОРОСТЬЮ БИОХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

**Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Халупник С.С.
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Для реализации специально разработанной ранее математической модели плазмонной поддержки биохимической реакции произведены расчеты факторов Франка-Кондона для условного фермент-субстратного комплекса (ESC) с использованием электронных термов в виде параболических потенциалов (гармонический осциллятор) и потенциалов Морзе. Исследованы зависимости величин факторов Франка-Кондона от колебательных квантовых чисел основного и возбужденного термов ESC, радиуса смещения термов по ядерной координате, а также других параметров потенциалов гармонического осциллятора и Морзе. Рассчитана плотность потока для начального стационарного состояния ESC в потенциальной яме, описываемой потенциалом Морзе, при различных параметрах системы.

Ключевые слова: биохимические реакции, плазмонная наночастица, электронный терм, фактор Франка-Кондона

В работе [1] была предложена математическая модель плазмонной поддержки некоторой биохимической реакции (БХР). В качестве ключевого этапа процесса рассматривалась инициация электронного перехода между адиабатическими электронными термами фермент-субстратного комплекса (ESC) в результате поглощения им плазмона, с последующим диффузионным перемещением плотности состояния по термам ESC к точкам максимумов потенциальных барьеров и итоговым перемещением в область продуктов реакции. В ходе реализации ранее намеченной программы исследований, изложенной в [1], в настоящей работе была рассчитана плотность потока вероятности выхода системы из потенциальной ямы, описываемой потенциалом Морзе. Проанализированы стационарные и нестационарные варианты скорости выхода из потенциальных ям реагентов в ямы продуктов, а также оценено влияние плазмонного фактора на константу скорости условной биохимической реакции. Были произведены расчеты факторов Франка-Кондона (ФК) для модельного фермент-субстратного комплекса с использованием электронных термов в виде потенциалов гармонического осциллятора и потенциалов Морзе. На основе выполненных расчетов были исследованы зависимости величин факторов Франка-Кондона от колебательных квантовых чисел основного и возбужденного термов ESC, величины смещения термов по ядерной координате комплекса, а также других параметров потенциалов гармонического осциллятора и осциллятора Морзе.

Предполагается, что в ходе протекания БХР сам ESC находится вблизи плазмонной наночастицы (НЧ). В результате действия электромагнитного поля световой частоты в НЧ образуются локализованные поверхностные плазмоны. При поглощении плазмона ESC переходит в возбужденное состояние и далее происходит движение плотности этого состояния по терму с достаточно низким потенциальным барьером. На рис. 1 показаны пересечения термов реагента в основном и возбужденном состоянии с распадным термом продукта БХР.

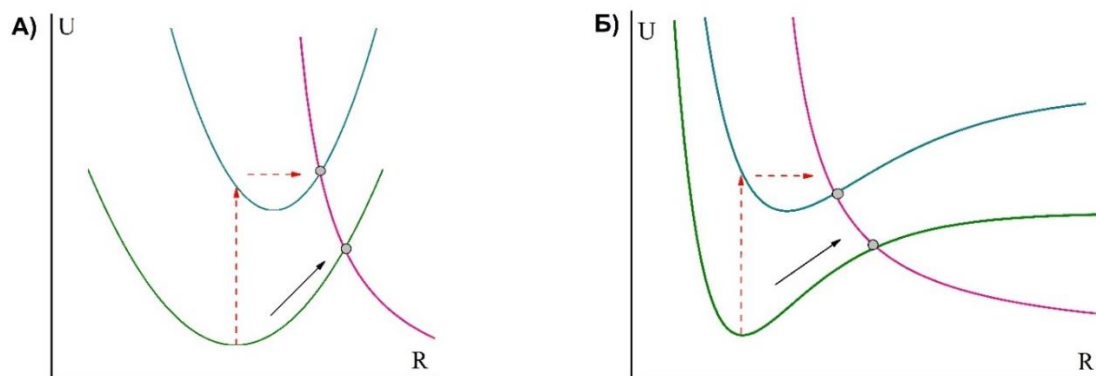


Рис. 1. Схема плазмонного инициирования биохимической реакции, предложенная в [1], для переходов между параболическими термами (А) и термами Морзе (Б). Черные (сплошные) стрелки указывают направления переходов для реакции в отсутствие плазмонной поддержки, а красные (пунктирные) стрелки задают направления дополнительных переходов для реакции с плазмонным ассистированием

То обстоятельство, что высота потенциального барьера, возникающего при пересечении верхнего терма с распадным может оказаться ниже, чем высота барьера для нижнего терма, будет приводить к ускорению БХР. Кроме того, включение в схему дополнительных переходов, открывает параллельный канал реакции, что, в свою очередь, способствует увеличению ее скорости.

Общая формула для скорости биохимической реакции с плазмонным ассистированием может быть записана в виде произведения трех факторов [1]:

$$K = w(\omega)(1 - W(t))F(\omega), \quad (1)$$

или

$$K = w(\omega)(1 - \exp(-j_{01}t))F(\omega), \quad (2)$$

где $w(\omega)$ – плазмонный фактор, представляющий собой вероятность передачи энергии в единицу времени от плазмон-активированной наночастицы на ESC, находящийся на расстоянии r от центра шаровой НЧ в результате взаимодействия его переходного дипольного момента \mathbf{p} с полем плазмонов НЧ

$$w(\omega) = \frac{2\gamma_D}{\hbar^2} \frac{|\mathbf{p}[\tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})\tilde{\alpha}(\omega)]\mathbf{E}_0|^2}{(\omega - \omega_f)^2 + \gamma_D^2}. \quad (3)$$

Здесь $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ – статическая диадическая функция Грина точечного

дипольного источника; ω_{if} – частоте максимума поглощения молекулярного комплекса; $\tilde{\alpha}(\omega)$ – тензор поляризуемости наночастицы во внешнем поле \mathbf{E}_0 . Если активация плазмонов в НЧ возникает не в результате ее фотовозбуждения, а по иному механизму, тогда напряженность \mathbf{E}_p плазмонного поля наночастицы в области нахождения ESC определяется произведением $\mathbf{p}\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})\mathbf{P}_{NP}$, где \mathbf{P}_{NP} – дипольный момент НЧ. Безразмерный множитель $W(t)$ в (1) представляет собой фактор Крамерса, т.е. вероятность отсутствия ухода молекулярной системы из области составляющих ее реагентов. В частном случае стационарной плотности диффузионного потока j_{01} получаем формулу (2) с временной экспонентой. Наконец $F(\omega)$ в (1) представляет собой фактор Франка-Кондона ESC, который задается квадратом интеграла перекрытия $S_{nm\mu n'm'_\mu} = \int \chi_{nm\mu}(q_\mu) \chi_{n'm'_\mu}(q_\mu) dq_\mu$ колебательных волновых функций начального $\chi_{nm\mu}(q_\mu)$ и конечного $\chi_{n'm'_\mu}(q_\mu)$ электронных состояний n и n' : $F_{nn'} = |S_{nm\mu n'm'_\mu}|^2$. В приближении независимых (нормальных) колебаний с набором ядерных координат $q = \{q_\mu\}$ ESC интегралы перекрытия состояний n и n' сводятся к произведению $S_{nm\mu n'm'_\mu}(q) = \prod_\mu S_{nm\mu n'm'_\mu}$, где $S_{nm\mu n'm'_\mu}$ – интеграл перекрытия μ -го осциллятора.

В случае аппроксимации электронных термов параболическими потенциалами волновая функция гармонического осциллятора для m -го колебательного числа электронного термина n имеет вид:

$$\chi_{nm}(q) = \frac{1}{\sqrt{2^m m!}} \left(\frac{M\omega_n}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{M\omega_n q^2}{2\hbar}\right) H_m\left(\sqrt{\frac{M\omega_n}{\hbar}} q\right), \quad (4)$$

где $H_m(q) = (-1)^m \exp(q^2) \frac{d^m}{dq^m} \exp(-q^2)$ – полином Эрмита; M –

приведенная масса молекулы; ω_n – частота колебаний молекулы в терме n . В случае потенциала Морзе

$$U_n(R) = D_n \left\{ \exp[-2\alpha_n(R - R_e)] - 2\exp[-\alpha_n(R - R_e)] \right\}, \quad (5)$$

спектр собственных значений энергии E колебаний имеет вид

$$E = E_n(R_e) + \hbar\omega_n \left(m + \frac{1}{2} \right) - \frac{(\hbar\omega_n)^2}{4D_n} \left(m + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (6)$$

где ω_n – частота колебаний в электронном состоянии n ; $m=0,1,2,3,\dots$ – колебательное квантовое число в электронном состоянии n ; D_n – энергия диссоциации; $\alpha_n = \omega_n \sqrt{M / 2D_e}$ – постоянная ангармонизма – параметр,

определяющий крутизну потенциальной кривой (5).

При введении безразмерных параметров $\sigma_n = \frac{2D_e}{\hbar\omega_n} - \frac{1}{2}$ и $x_n = (2\sigma_n + 1)\exp[-\alpha_n(q - q_n)]$, волновая функция ангармонического осциллятора Морзе колебательного состояния nm принимает вид

$$\chi_{nm}(q) = \left[\alpha_n \frac{m!2(\sigma_n - m)}{\Gamma(2\sigma_n - m + 1)} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}x_n\right) x_n^{\sigma_n - m} L_m^{2\sigma_n - 2m}(x_n), \quad (7)$$

где; $L_m^{(a)}(x_n) = \frac{x_n^{-a} \exp(x_n)}{m!} \frac{d^m}{dx_n^m} (x_n^{m+a} \exp(-x_n))$ – полином Лаггера;

$\Gamma(x)$ – гамма-функция. В отличие от гармонического осциллятора волновая функция осциллятора Морзе (7) не симметрична.

Для случая гармонического осциллятора в [2] было получено точное аналитическое выражение для одномерного интеграла перекрытия при переходе из основного колебательного состояния $m=0$ терма n в возбужденное $n'm'$.

$$S_{n0n'm'} \left[\frac{2\sqrt{f_{m'}}}{(1+f_{m'})m'!2^{m'}} \right]^{1/2} \exp\left[-\frac{\xi}{(1+f_{m'})} \right] \left(\frac{1-f_{m'}}{1+f_{m'}} \right)^{m'/2} i^{m'} H_{m'} \left[i \left(\frac{2\xi f_{m'}}{1-f_{m'}^2} \right)^{1/2} \right], \quad (8)$$

где $f_{m'} = \omega_n / \omega_{n'}$, – отношение частоты в верхнем электронном состоянии к частоте в нижнем состоянии; $\xi = 1/2(\Delta q / b_{0n})^2$ – безразмерный квадрат смещения положения равновесия по ядерной координате; $b_{0n} = \sqrt{\hbar / (M\omega_n)}$ – амплитуда нулевых колебаний; $\Delta q = q_n^0 - q_{n'}^0$ – смещение положения равновесия.

Наличие у осциллятора Морзе дополнительного параметра α_n значительно увеличивает число ситуаций, в которых получаются различные формулы для интеграла перекрытия. Точное аналитическое решение интеграла перекрытия для потенциала Морзе можно получить [3], приняв параметр α_n одинаковым в рассматриваемых электронных состояниях:

$$S_{nmn'm'} = 2 \left[m!m'!(\sigma_n - m)(\sigma_{n'} - m') \frac{\Gamma(2\sigma_n - m + 1)}{\Gamma(2\sigma_{n'} - m' + 1)} \right]^{1/2} (1-z)^{\sigma_n - m} (1+z)^{\sigma_{n'} - m'} \times \\ \times \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^{k+m'} \Gamma(\sigma_n + \sigma_{n'} - m - m' + k)}{k!(m-k)!\Gamma(2\sigma_n - 2m + k + 1)} (1-z)^k P_{m'}(\sigma_n - \sigma_{n'} - m + k - 1, 2\sigma_n - 2m'; 1 + 2z)$$

$$z = \frac{1 - \lambda}{1 + \lambda}, \quad \lambda = \frac{2\sigma_n + 1}{2\sigma_{n'} + 1} \exp[\alpha_n(q_n - q_{n'})] \equiv f_{m'} \exp[\alpha_n \Delta q], \quad (9)$$

где $f_{m'} = \omega_n / \omega_{n'}$ – то же отношение частот, что и в (8); $P_{m'}(x)$ – полином Якоби.

Расчет ключевых факторов константы скорости биохимической реакции, связанных с формой и взаимным расположением адиабатических термов фермент-субстратного комплекса

1. Плазмонный фактор

Плазмонный фактор $w(\omega)$ фактически был детально рассчитан для различных пространственных конфигураций ESC относительно сферической плазмонной наночастицы в [4-5]. Было установлено, что в зависимости от геометрических параметров системы «поле-наночастица-молекула» возможно как усиление, так и ослабление поглощения света молекулярным комплексом вблизи от плазмонной НЧ. Однако усреднение вероятности перехода $w_{abs}(\omega)$ по всевозможным угловым конфигурациям, проведенное для случая изотропной системы показало, что среднее значение этой вероятности всегда увеличивается в присутствии плазмонной наночастицы. Заметим, что модифицированный электронный дипольный момент $\mathbf{p}[\tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})\tilde{\alpha}(\omega)]$ системы «молекула-наночастица» определяет как скорость поглощения квантов света $w_{abs}(\omega)$, так и вероятность $w(\omega)$ передачи энергии в единицу времени от плазмон-активированной наночастицы на ESC, представленную формулой (3).

2. Скорость выхода из потенциальной ямы реагентов ESC

Стационарная скорость выхода

Для стационарной плотности диффузионного потока j системы, движущейся в потенциале $V(z)$ справедливо решение Крамерса

$$j = D \left(\int_{z_0}^{z_m} \exp\left[-\frac{V(z)}{k_B T}\right] \int_z^{z_m} \exp\left[\frac{V(z')}{k_B T}\right] dz' dz \right)^{-1}, \quad (10)$$

где z_0 – точка начальной локализации условной частицы-диффузанта; z_m – точка максимума барьера.

В модели [1] при $t \rightarrow \infty$ ненулевое стационарное значение плотности потока имеет вид:

$$j_{st}(z) = D \left[\frac{dV(z)}{dz} \frac{1}{k_B T} + \frac{\beta}{k_B T} \right]_{z=b} g_{eq}(z), \quad (11)$$

где D – коэффициент диффузии системы в терме; $k_B T$ – произведение постоянной Больцмана на абсолютную температуру; β – тангенс угла наклона распадного терма в точке b ; $g_{eq}(z)$ – функция равновесного больцмановского распределения

$$g_{eq}(z) = \left(\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{V(z)}{k_B T}\right) dz \right)^{-1} \exp\left(-\frac{V(z)}{k_B T}\right). \quad (12)$$

Десорбция из параболической ямы для случая невысоких температур была рассмотрена в [1]. Для параболического потенциала в точке пересечения термов b получаем

$$j_{par}(b) = D \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi k_B T}} \left(\frac{\kappa b + \beta}{k_B T} \right) \exp\left(-\frac{\kappa b^2}{2k_B T}\right). \quad (13)$$

Для стационарного значения плотности потока в случае потенциала Морзе получаем

$$j_{Morse}(b) = D \left[\frac{2D_{eq} \alpha [f(\alpha l) - f(2\alpha l)] - \beta}{k_B T} \right] \exp\left[-\frac{D_{eq} f(2\alpha l) - 2f(\alpha l)}{k_B T} \right] \times \quad (14)$$

$$\times \left(\int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{D_{eq} f(2\alpha(z - z_0)) - 2f(\alpha(z - z_0))}{k_B T} \right] dz \right)^{-1}$$

$$f(\alpha l) = \exp[-\alpha(b - z_0)], \quad l = b - z_0,$$

где D_{eq} – энергия диссоциации; α – параметр, определяющий крутизну потенциальной кривой; z_0 – точка минимума потенциальной ямы.

Расчеты стационарной скорости выхода молекулярной системы из потенциальной ямы ESC для различных значений параметров потенциала Морзе и температуры

На графиках рисунка 2 наблюдается уменьшение скорости выхода системы при увеличении температуры в пределах смещения вершинной точки барьера из точки минимума ямы до точки пересечения графиков при $b=1.23 \cdot 10^{-8}$ см. Из графиков видно, что максимальная скорость выхода системы при повышении температуры от 300 К до 500 К уменьшается в 2 раза. Однако после точки пересечения графиков скоростей имеет место увеличение значений скорости выхода с увеличением температуры. При температуре 300К скорость выхода уменьшается в 6,25 раза при движении системы от минимума потенциальной ямы к вершинной точки барьера, равной $b=1.23 \cdot 10^{-8}$ см. При этом скорость выхода при $T=500$ К уменьшается в 2.8 раза.

На графике рисунка 3 наблюдается увеличение скорости выхода системы

из ямы реагентов при увеличении температуры до точки экстремума, приближённо равной 250 К, после чего, по мере увеличения температуры, происходит монотонное уменьшение скорости выхода в соответствии с рис. 2. Из графика видно, что указанная скорость увеличивается в 2.7 раз при изменении температуры от 100 К до 250 К.

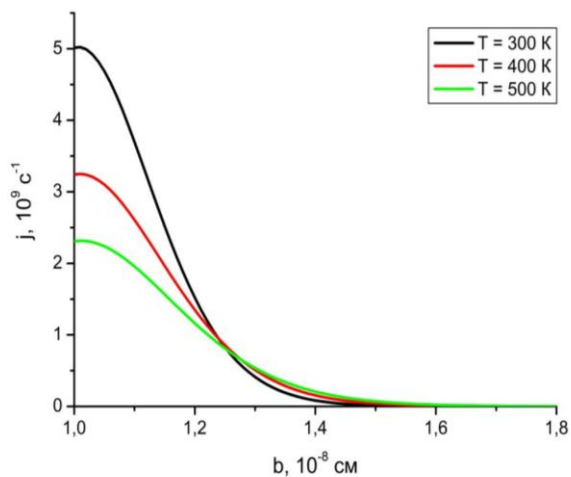


Рис. 2. Зависимость скорости выхода

системы из потенциальной ямы реагентов от положения вершинной точки барьера при ESC от температуры. Движение от минимума различных температурах T . Движение от потенциальной кривой $z_0=10^{-8}$ см в сторону точки минимума ямы $z_0=10^{-8}$ см

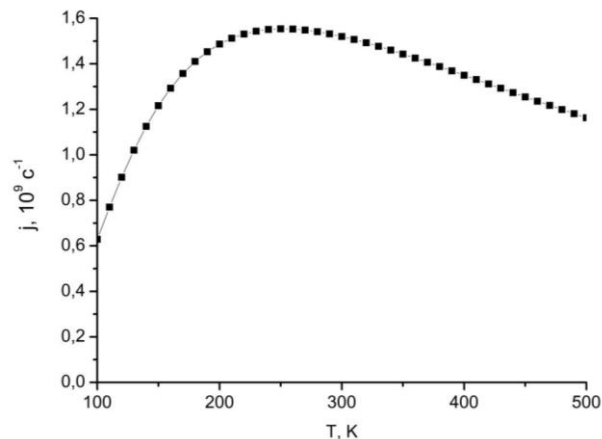


Рис. 3. Зависимость скорости выхода

системы из потенциальной ямы реагентов от температуры. Движение от минимума потенциальной кривой $z_0=10^{-8}$ см в сторону вершинной точки барьера $b=1.2 \cdot 10^{-8}$ см

Формула Крамерса (10) для диффузионного потока вероятности выхода частицы из ямы описывает стационарный поток частиц, преодолевающих энергетический барьер за счёт тепловой активации и диффузионного движения. Она связывает скорость выхода частицы с параметрами потенциала (высотой и формой барьера), температурой и коэффициентом диффузии, отражая баланс между удерживающими силами в яме и вероятностью преодоления барьера.

Нестационарная скорость выхода из параболической и полупараболической ямы

Отдельный интерес представляет собой решение нестационарной задачи выхода ESC-системы из потенциальной ямы с барьером заданной формы. При ФК-переходе при поглощении системой плазмона с нижнего адиабатического терма на возбужденный терм в начальный момент времени система на возбужденном терме находится в точке поворота с сильной локализацией в этой точке. Лишь с течением времени происходит расплывание координатного распределения населенности по возбужденному терму с последующим преодолением потенциального барьера и выходом системы в яму продуктов реакции. Точное аналитическое решение нестационарной задачи эволюции в терме известно для параболического и полупараболического потенциалов, которыми могут быть аппроксимированы реальные адиабатические термы ESC. Отметим что точки поворота на возбужденном терме «привязаны» к

энергетическим уровням колебательных состояний ESC, поэтому переход в эти точки возможен лишь при определенной величине сдвига, основного и возбужденного термов с точным «попаданием стрелки» вертикального ФК-перехода в точку поворота для уровня с заданным колебательным квантовым числом n' верхнего терма.

Согласно принципу Франка-Кондона, начальная точка появления ESC на возбужденном терме соответствует точке поворота, связанной с колебательным квантовым числом m' . Наиболее вероятный переход происходит из минимума потенциальной ямы основного терма в точку поворота на возбужденном терме, которая соответствует максимуму плотности вероятности.

Вероятность нахождения системы внутри слоя толщиной b в момент времени t описывается следующей формулой:

$$W(t) = \exp \left[- \int_0^t j(b, \xi; t') dt' \right]. \quad (15)$$

При движении системы в параболической яме плотность вероятности $g(z, \xi; t)$ для системы, появившейся в начальный момент в точке ξ в параболической яме, убывающая до бесконечности при $|z| \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$g(z, \xi; t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\theta(t)}} \exp \left[- \frac{(z - \xi \exp[-t / \tau_T])^2}{\theta(t)} \right], \quad (16)$$

$$\theta(t) = 2D\tau_T (1 - \exp[-2t / \tau_T]), \quad \tau_T = k_B T / (\kappa D),$$

где D – коэффициент диффузии системы в терме; κ – коэффициент жесткости гармонического осциллятора. Поскольку $0 < -(\partial V / \partial z)_{b+0} = \beta$ и $\xi < b$, плотность потока вероятности выхода из ямы положительна, т.е. вектор потока направлен вдоль z :

$$j(b, \xi; t) = D \left[\frac{2[b - \xi \exp(-t / \tau_T)]}{\theta(t)} + \frac{\beta}{k_B T} \right] g(b, \xi; t), \quad (17)$$

где функция $g(z, \xi; t)$ определена формулой (16).

Функция $W_\kappa(t - \tau)$ – это вероятность отсутствия ухода молекулы из области реагентов, и она может быть определена аналитически при задании потенциала $V(z)$ в виде полупараболы, т.е. вертикальной отталкивающей стенки в совокупности с правой ветвью параболы. Тогда потенциальную энергию $V(z)$ аппроксимируем функцией вида:

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & z = 0, \\ Kz^2/2, & 0 < z < z_m, \\ V_d(z - z_m), & z \geq z_m, \end{cases} \quad (18)$$

где $V_d(z - z_m) > 0$ – некоторая убывающая функция аргумента $z - z_m$.

Такой подход позволяет разработать приближенный метод для вычисления вероятности, основываясь на аналитическом решении уравнения Смолуховского в полупараболическом потенциале. Особенность данной модели заключается в применении модифицированного метода Крамерса, который учитывает нестационарность диффузионного потока через барьер из-за незавершенного релаксационного процесса в потенциале верхнего терма. В рамках данного метода вероятность нахождения частицы внутри слоя толщиной b в момент времени t описывается следующей формулой:

$$W(t - \tau) = \exp\left[-\int_0^{t-\tau} j(b, \zeta, t') dt'\right], \quad (19)$$

где

$$j(b, \zeta, t) = -D_z \left[\frac{\partial g_v(z, \zeta, t)}{\partial z} + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial V_d}{\partial z} g_v(z, \zeta, t) \right]_{z=b}. \quad (20)$$

поток частиц из потенциальной ямы, $g_v(z, \zeta, t)$ – функция Грина уравнения диффузии для полупараболического потенциала

$$g_v(z, \zeta, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\theta(t)}} \left[\exp\left(-\frac{[z - \zeta \exp(-t/\tau_T)]^2}{\theta(t)}\right) + \exp\left(-\frac{[z + \zeta \exp(-t/\tau_T)]^2}{\theta(t)}\right) \right] \quad (21)$$

где $0 < \zeta < z_m$ – стартовая точка в полупараболической яме терма.

3. Влияние ангармонизма потенциала и сдвига термов на величину фактора Франка-Кондона

Для гармонического осциллятора был проведен расчёт факторов Франка-Кондона F_{mn} по формуле (8), а также прямым численным интегрированием. Зависимости фактора F_{mn} от изменения частоты колебаний и взаимного смещения электронных термов для различных колебательных квантовых чисел в гармоническом приближении представлены на рис. 4 и 5.

Рассмотрим, вначале, графики рисунка 4. По оси абсцисс отложено отношение частот колебаний начального и конечного состояний, что и составляет относительную частоту. Зависимость факторов Франка – Кондона от относительной частоты для переходов между термами параболического типа

таково, что с увеличением колебательного квантового числа возбужденного терма наблюдается смещение точек максимума функций факторов ФК к началу координат и уменьшение значений этих факторов в точках максимума. Наибольшее значение фактора ФК наблюдается для наименьшей разности колебательных квантовых чисел m и m' .

Из представленных графиков рисунка 5 следует, что фактор Франка – Кондона в зависимости от квадрата смещения терма растет вплоть до некоторой экстремальной точки. По мере увеличения квантового числа m' возбуждённого терма наблюдается удаление точек максимума от начала координат и уменьшению значения фактора ФК в этих точках. Кроме того, при этом имеет место более медленное затухание функции фактора ФК при фиксированной относительной частоте.

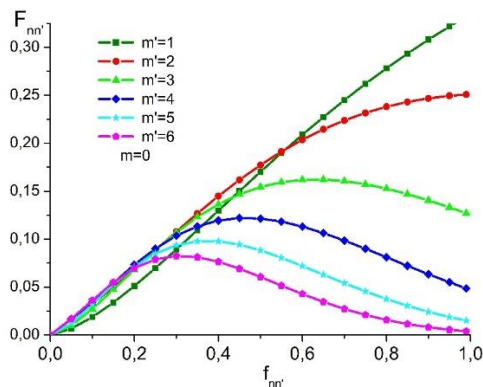


Рис. 4. Зависимости фактора ФК от отношения частоты в основном электронном состоянии к частоте в возбужденном состоянии. Каждая кривая соответствует переходам из колебательного состояния с $m=0$ в возбуждённое состояние с m' . Параболические термы смещены на величину $\xi=1,5$

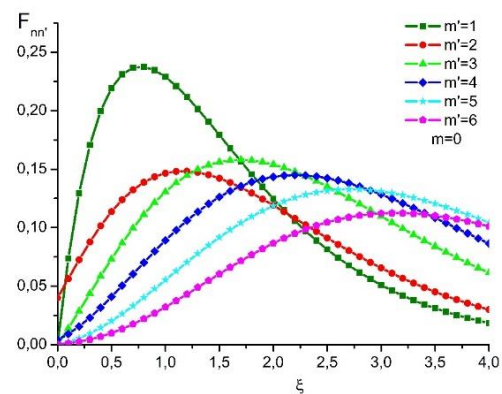


Рис. 5. Зависимости фактора ФК от безразмерной величины квадрата смещения параболических термов. Каждая кривая соответствует переходам из колебательного состояния $m=0$ в возбуждённое состояние m'

Факторы ФК для осциллятора Морзе также были рассчитаны двумя способами: с использованием аналитического выражения (9) для интеграла перекрытия $S_{nm_\mu n'm'_\mu} = \int \chi_{nm_\mu}(q_\mu) \chi_{n'm'_\mu}(q_\mu) dq_\mu$ и через прямую численную реализацию этой величины.

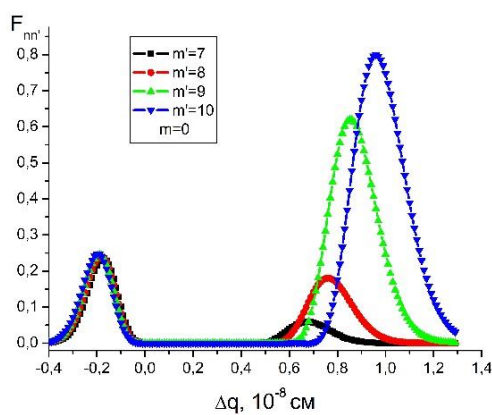


Рис. 6. Зависимость фактора ФК от смещения термов при переходах из основного колебательного состояния $m=0$ в возбужденные состояния m' . При расчете терм возбужденного состояния оставался неподвижным, а терм основного состояния сдвигался по оси q

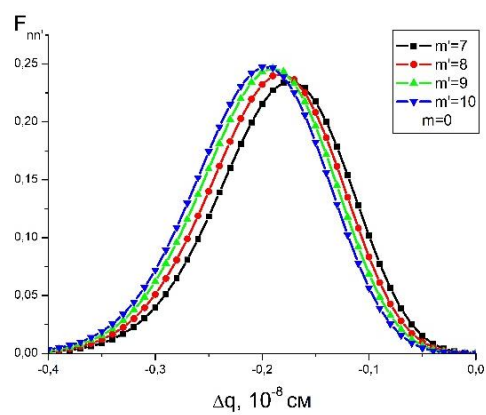


Рис. 7. Зависимость фактора ФК от смещения термов при переходах из основного колебательного состояния $m=0$ в возбужденные состояния m'

При расчетах терм возбужденного состояния оставался неподвижным, а терм основного состояния сдвигался в направлении оси q . На рисунке 6 график зависимости фактора Франка – Кондона имеет несколько различных пиковых значений в точках максимума при различных колебательных квантовых числах термов возбуждённых состояний. Для всех значений квантовых чисел возбуждённого электронного терма возникает максимум функции фактора ФК при отрицательном смещении на величину $\Delta q = -0.2 \cdot 10^{-8}$ см. Справа от первого максимума наблюдается ещё один максимум, положение которого зависит от разности колебательных уровней рассматриваемых термов. При увеличении квантового числа m' возбуждённого терма максимум фактора ФК смещаются вправо, а пиковые значения функции фактора увеличиваются. Это становится особенно заметным для квантовых чисел $m' = 8$ и $m' = 9$, когда расхождение в максимумах функции фактора ФК резко увеличивается.

На рисунке 7 отдельно изображены максимумы, которые наблюдаются в окрестности точки $\Delta q = -0.2 \cdot 10^{-8}$ см на графиках рисунка 6. Из рис. 7 видно, что при увеличении квантового числа m' возбуждённого терма максимум фактора ФК смещается в сторону отрицательных значений Δq , а пиковые значения фактора ФК увеличиваются.

Таким образом, в результате численной реализации модели [1], в работе сделаны количественные оценки и определены значения трех характерных факторов, определяющих скорость некоторой условной биохимической реакции [6-8] с плазмонным ассистированием.

Список литературы

1. Кучеренко М. Г. К общей теории плазмонного ассистирования биохимических реакций // Химическая физика молекул и полифункциональных материалов [Электронный ресурс]: сборник матер. Международ. научной

конфер. /Под общей ред. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М., Русинова А.П.; Оренбургский гос. ун-т. –Оренбург: ОГУ, 2024. С. 14-20.

2. *Beddard G., Fleming G., Gijzeman O., Porter G.* Internal conversion from vibrationally excited levels // *Chem. Phys. Letters*. 1973. – V. 8. – №. 4. – P. 481-487.

3. *Медведев, Э.С.* Теория безызлучательных переходов в многоатомных молекулах / Э.С. Медведев, В.И. Ошеров // М.: Наука. – 1983. – 280 с.

4. *Rusinov A.P., Kucherenko M.G., Gladysheva Yu.A.* // *Proc. Russian-Japanese Confer. «Chem. Phys. of Molecules and Polyfunkt. Materials»*: OSU, Orenburg, Russia / 2014. – P. 20-22.

5. *Русинов А.П., Кучеренко М.Г.* // *Вестник ОГУ*. 2015. №13 (188). С. 195-202.

6. *O. Guseynikova, J. Váňa, L. Trinh Phuong, I. Panov, L. Rulišek, A. Trelin, P. Postnikov, V. Švorčík, E. Andris and O. Lyutakov* Plasmon-assisted click chemistry at low temperature: an inverse temperature effect on the reaction rate // *Chem. Sci.*, 2021, 12, P. 5591–5598

7. *P. Bainova, J.-P. Joly, M. Urbanova, D. Votkina and others.* Plasmon-Assisted Chemistry Using Chiral Gold Helicoids: Toward Asymmetric Organic Catalysis // *ACS Catal.* 2023, 13, P. 12859–12867

8. *C. Moularas, Ai. Gemenetzi, Y. Deligiannakis and M. Louloudi* Nanoplasmonics in Catalysis for Energy Technologies: The Concept of Plasmon-Assisted Molecular Catalysis (PAMC) // *Nanoenergy Adv.* 2024, 4(1), 25-44.

ГИБРИДНАЯ СРЕДА ДЛЯ ОПТИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМОГО ТРАНСПАРАНТА

Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент,

Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук,

Раздобреев Д.А., канд. хим. наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

К перспективным оптическим материалам в последние годы относятся среды биологического происхождения, и, в частности, содержащие светочувствительный белок бактериородопсин (БР) [1-4]. Такое внимание к бактериородопсину основано на уникальных свойствах содержащих БР сред. Материалы на основе БР демонстрируют фотохромные и фотоэлектрические свойства, долговечность при сохранности характеристик (молекулы БР имеют квазикристаллическую упаковку, которая придаёт всей структуре устойчивость к физико-химическим воздействиям).

Бактериородопсин – это ретиналь-содержащий трансмембранный белок, который содержится в клеточной мембране галофильных архебактерий, например, *Halobacterium salinarum*. Белок функционирует как светозависимый протонный насос, обеспечивающий образование градиента протонов на поверхности мембраны клетки, который, в свою очередь, служит для аккумуляции энергии. БР осуществляет бесхлорофилльный фотосинтез в клетках архебактерий, т.е. является простейшим биологическим преобразователем световой энергии.

При поглощении кванта света происходит транс-цис-изомеризация ретиналя, БР претерпевает ряд фотохимических превращений, называемых фотохимическим циклом. Промежуточные продукты цикла (интермедиаты) обозначаются латинскими буквами и цифрами, соответствующими максимумам спектров поглощения интермедиатов. Каскад быстрых фотохимических реакций, которые происходят при осуществлении фотоцикла бактериородопсина в пурпурных мембранах галобактерий, длится от пикосекунд до нескольких миллисекунд. Темновая реизомеризация ретиналя обратно в полностью-транс форму происходит в миллисекундном диапазоне.

Как показано в [5] для практических применений БР как фотохромной молекулы, на основе которой создаются пленочные образцы, можно рассматривать упрощенный фотоцикл БР. Он включает в себя исходное состояние B570 или BR570 и долгоживущий промежуточный продукт M410, поглощающий в фиолетовой области,

В пленочных образцах БР процессы фотоцикла существенно замедляются. Так время исчезновения фотопродукта M в плёнках БР в желатиновой матрице [6] увеличивается примерно на три порядка, по сравнению с таковым для водной суспензии ПМ.

Существуют работы, посвященные функционированию БР в фотонных приложениях с использованием посредников-сенситизаторов. Это делается с целью улучшения характеристик БР, расширения спектра чувствительности БР-содержащих устройств или такого подхода требует сама область его применения. Основным механизмом сенситизации чувствительности БР в таких работах является безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения от молекул-доноров к акцепторам энергии. В литературе процесс индуктивно-резонансного переноса энергии получил название «Фёрстеровский резонансный перенос энергии» (Förster resonance energy transfer, FRET).

Ранее мы использовали методику FRET для разработки высокоэффективной среды лазера на красителях на основе специально подобранной биополимерной хитозан-желатиновой матрицы [7]. В настоящей работе мы использовали FRET от молекул органического красителя (Кр) акридинового оранжевого на БР чтобы продемонстрировать простую модель фотохромной ячейки с управляемой прозрачностью.

Цель работы: демонстрация возможности сенситизированного управления фотохромизмом пленочной формы бактериородопсина посредством безызлучательного переноса энергии от молекул органических красителей и, в качестве примера, модели элементарного полностью оптически управляемого транспаранта. Акцептором энергии служил бактериородопсин, содержащийся в БР-содержащей пленке Биохром (такие пленки были специально разработаны в Институте Биологической физики АН СССР как среда для оптической записи информации), а донором - органический краситель акридинового ряда акридиновый оранжевый.

Для получения донорно-акцепторной системы в пленку Биохром вводили ограниченное количество красителя акридинового оранжевого (АО) (Sigma-Aldrich). Для этого каплю водного раствора Кр объемом 10 мкл и концентрацией 10^{-4} моль/л наносили на поверхность пленки. Раствор красителя пропитывал пленку, и после высыхания в пленке формировалась область со смесью БР и АО (гибридная система или комплекс), имеющая приблизительно цилиндрическую форму диаметром 5 мм и толщиной 100 мкм. Последняя величина соответствовала толщине пленки Биохром. Толщину пленки измеряли микрометрическим индикатором.

Спектры поглощения и флуоресценции пленок регистрировали установке, основанной на оптоволоконном спектрометре AvaSpec 2048 (Avantes), работающем в режиме полихроматора.

Для исследования спектров флуоресценции АО в желатине использовали фотографический желатин марки А. Методика приготовления пленок желатина описана в [7]. Для возбуждения стационарной флуоресценции и обратимого обесцвечивания БР использовали DPSS cw лазер KLM-473 (473 нм) (ФТИ-Оптроник).

Процесс безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения широко используется в молекулярной фотонике. Это, например, известные

методики [8] изучения взаимодействий между биомолекулами, для измерения межмолекулярных расстояний, а также для создания fret-лазеров [7].

В данной работе мы применили метод FRET для управления пропусканием системы БР-Кр путем переноса на фотохромный БР-акцептор (А) энергии возбуждения от молекул донора-посредника (D).

Как известно константа скорости переноса k_T зависит от нескольких факторов и компактно может быть выражена в виде [8]

$$k_T = \alpha R^{-6} \Phi^2 n^{-4} \varphi_D \tau_D^{-1} J$$

где α – коэффициент пропорциональности,

φ_D – квантовый выход флуоресценции донора в отсутствие акцептора,

τ_D – время жизни возбужденного состояния молекул донора в отсутствие переноса энергии,

n – показатель преломления среды,

Φ – фактор взаимной ориентации дипольных моментов перехода донора и акцептора ($0 \div 2$),

R – расстояние между D и А,

J - интеграл перекрытия спектров флуоресценции донора и поглощения акцептора.

Перенос энергии осуществляется, если:

Донор обладает способностью к люминесценции;

Молекулы D и А достаточно сближены;

Спектр флуоресценции донора должен перекрываться со спектром поглощения акцептора.

D и А должны быть удачно ориентированы друг относительно друга;

Все вышеобозначенные факторы (кроме последнего) были учтены при выборе донора – красителя акридинового оранжевого. АО обладает высоким квантовым выходом флуоресценции[9].

На рисунке 1 представлены нормированные спектры флуоресценции АО в пленке желатина с концентрацией 10^{-4} моль/л и поглощения БР в «чистой» пленке Биохром.

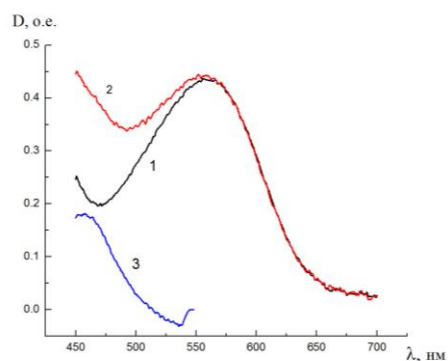
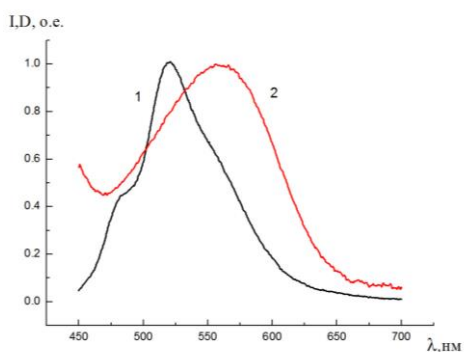


Рис. 1. Спектры флуоресценции АО в пленке желатина ($c = 10^{-4}$ моль/л) и поглощения БР в «чистой» пленке Биохром –

⁴ моль/л) – 1 и поглощения БР в 1, комплекс Биохром-АО – 2 и АО в пленке Биохром – 2. области иммобилизации – 3.

Из рисунка видно, что спектры в значительной степени перекрываются, что указывает на высокую вероятность FRET в системе БР-АО.

На рисунке 2 представлены спектры поглощения в видимой области «чистой» пленки Биохром, гибридной системы Биохром-АО и разностный спектр, соответствующий поглощению только красителя-донора.

Из рисунка видно, что максимум спектра оптической плотности АО в пленке расположен в области 460 – 470 нм. Это свидетельствует о том, что краситель в гибридной системе находится в форме димеров и, преимущественно, более крупных ассоциатов.

Лазерное излучение на длине волны 473 не вызывало само по себе изменений в спектре акцептора – БР, но в комплексе с АО запускало фотохромный цикл БР, т.е. исчезновение поглощения в области 500 – 600 нм.

В процессе обесцвечивания БР в пленке не происходило качественных изменений спектра в видимой области. Эффективность перехода БР из формы В в состояние М в нашем случае составила 40 % и является предельной для нашего образца. В [6] отмечается, что КПД преобразования В→М зависит от состава смеси компонентов пленки и достигает 90 – 100 %.

Возвращение системы в исходное состояние происходит самопроизвольно или принудительно путем подсветки на длине волны 405 нм. Самопроизвольный процесс восстановления исходной формы БР занимает около 40 с. Искусственный перевод системы из М в В-форму низкоинтенсивным излучением 405 нм происходит практически мгновенно.

Результаты данной работы были апробированы на: XXII Международной конференции по голографии и прикладным оптическим технологиям ХОЛОЭКСПО 2025 (Уфа, 8–12 сентября 2025 года) [10].

Благодарность

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

Список литературы

1. Ashwini R., Vijayanand S., Nemapriya J. Photonic Potential of Haloarchaeal Pigment Bacteriorhodopsin for Future Electronics: Review // *CurrMicrobiol.* 2017. V. 74. P. 996–1002. <https://doi.org/10.1007/s00284-017-1271-5>
2. Saeedi P., Moosaabadi J. M., Sebtahmadi S. S., Mehrabadi J. F., Behmanesh M., Mekhle S. Potential applications of bacteriorhodopsin mutant // *Bioengineered.* 2012. V. 3. №. 6. P. 326–328. <https://doi.org/10.4161/bioe.21445>
3. Li Y-T., Tian Y., Tian H., Tu T., Gou G-Y., Wang Q., Qiao Y-C., Yang Yi., Ren T-L. A Review on Bacteriorhodopsin-Based Bioelectronic Devices // *Sensors (Basel).* 2018. V. 18. №.5. P. 1368. <https://doi.org/10.3390/s18051368>
4. Ranaghan M.J., Wagner N.L., Sandberg M.N., Birge R.R. Optical applications of biomolecules // *Optical Biomimetics. Materials and Applications.*

Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials. 2012. P. 20-78.
<https://doi.org/10.1533/9780857097651.20>

5. Druzhko A. B., Dyukova T. V. Phototransformations of bacteriorhodopsin and its derivatives in polymer matrices // Trends in Photochemistry and Photobiology. 2011. V. 13. P. 13-24.

6. Дружко А.Б. Бактериородопсин: фундаментальные аспекты и возможности для практического применения / А.Б. Дружко — М.: РАН, 2022. — 92с.

Druzhko A.B. Bacteriorhodopsin: fundamental aspects and possibilities for practical application . Moscow: RAS, 2022. 92 p.

7. Лантух Ю.Д. Сенсibilизированная флуоресценция и суперлюминесценция красителя в функциональной хитозан-желатиновой матрице / Лантух Ю.Д., Летута С.Н., Алиджанов Э.К. // Оптический журнал. 2021. Т. 88. № 10. С. 59–64. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2021-88-10-59-64>

8. Лакович Д. Основы флуоресцентной спектроскопии / Лакович Д. – М.: Мир, 1986. 496 с.

9. Грачев. А.В. Фотоэнергетика молекулярных форм акридиновых красителей в полимерных матрицах / Грачев. А.В., Пономарев А.Н., Южаков В.И // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. 1992. № 6. С. 30 -37.

10. Лантух Ю. Д. Перенос энергии электронного возбуждения между молекулами органических красителей и бактериородопсином / Лантух Ю. Д. // ХОЛОЭКСПО 2025: XXII Международная конференция по голографии и прикладным оптическим технологиям (Уфа, 8–12 сентября 2025 года): тезисы докладов». — Москва : Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2025. — С.277-279.

БАЗА ДАННЫХ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ КОМПОЗИТОВ КАК ОСНОВА ДЛЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Одним из наиболее актуальных направлений в создании функциональных материалов и композитов на основе алюмосиликатов является использование наночастиц. Интерес к ним обусловлен тем, что благодаря размерным эффектам такие материалы приобретают принципиально новые свойства (повышенную удельную поверхность, каталитическую активность и механическую прочность, повышенную проводимость и т.п.), что открывает возможности для создания более эффективных композитов [1-3].

Однако разработка таких новых материалов до сих пор в значительной степени опирается на ресурсоемкий и длительный эмпирический подход. В связи с этим существует потребность в создании инструментов для ускоренного прогнозирования характеристик как конечных керамических материалов, так и используемого для их синтеза сырья.

Решение этой задачи требует применения методов компьютерного моделирования и технологий искусственного интеллекта, в частности, машинного обучения (ML). Данные подходы позволяют существенно сократить время и ресурсы, затрачиваемые на разработку материалов с заданными свойствами. В качестве основы для построения таких интеллектуальных систем предлагается создать специализированную базу данных. Ее ключевая роль заключается в накоплении и структуризации знаний между:

- 1) составом и типом алюмосиликатной матрицы;
- 2) параметрами интеркалируемых наночастиц (химическая природа, размер, концентрация);
- 3) условиями и типом процесса синтеза композита (температура, время, рН);
- 4) конечными функциональными и эксплуатационными характеристиками полученных материалов.

Объектом исследования в данной работе выступают композитные материалы на основе алюмосиликатных матриц с интеркалированными наночастицами. Предметом исследования – зависимости функциональных свойств этих материалов от ключевых факторов синтеза и состава: типа алюмосиликатной матрицы, характеристик наночастиц (природа, размер, концентрация) и параметров процесса интеркаляции. Предлагаемая структура базы данных, предназначенной для выявления указанных зависимостей с помощью методов машинного обучения, представлена в виде таблицы 1.

Таблица 1 – Предполагаемая архитектура базы данных для обучения ML-моделей, прогнозирующих свойства алюмосиликатных композитов

Блок	Название столбца	Тип данных	Описание и диапазон значений	Единицы измерения	Обоснование включения
Исходные компоненты	sample_id	Текст	Уникальный условный идентификатор образца	Текст	Необходим для однозначной идентификации
	matrix_type	Категория	Тип алюмосиликатной матрицы	Текст (выбор из списка)	Разные матрицы имеют разную способность к интеркаляции
	nanoparticle_type	Категория	Тип наночастиц	Текст (выбор из списка)	Определяет природу функциональных свойств
	np_concentration	Число	Концентрация вводимых наночастиц	%, масс.	Контроль концентрации обеспечивает свойства
	nanoparticle_size	Число	Диаметр наночастиц	нм	Контроль размера обеспечивает свойства
Условия интеркаляции	intercalation_method	Категория	Метод внедрения	Текст (выбор из списка)	Разные методы приводят к различной степени внедрения и различным изменениям свойств
	temperature	Число	Температура среды при синтезе композита	°С	Влияет на кинетику и термодинамику процесса интеркаляции
	time	Число	Время синтеза композита	Часы	Определяет степень завершенности процесса
	pH	Число	Кислотность среды при синтезе композита	-	Влияет на заряд поверхности частиц и матрицы
Структурные и физико-химические характеристики	interlayer_spacing	Число	Величина межслоевого расстояния (РФА)	нм	Показатель успешности интеркаляции

ки	surface_area	Число	Удельная поверхность (БЭТ)	м ² /г	Характеристика адсорбционной и каталитической активностью
Функциональные свойства композитов	adsorption_capacity	Число	Емкость адсорбции модельного загрязнителя	мг/г	Формирования сорбентов
	photocatalytic_activity	Число	Эффективность фотокаталитического разложения красителя под УФ	%	Формирования фотокатализаторов
	antimicrobial_efficiency	Число	Эффективность подавления роста бактерий	%	Формирования антимикробных материалов
	melting_point	Число	Температура плавления (размягчения) материала	°С	Формирования теплоизоляторов и огнеупоров

Учитывая, что прямое экспериментальное получение обширного и систематизированного массива данных «состав матрицы и наполнителя – свойства композита» требует огромных материально-технических и человеческих ресурсов, стратегия формирования разрабатываемой базы данных строится на получении информации из нескольких источников. Для заполнения разрабатываемой базы данных экспериментальными данными планируется использовать ресурсы научно-исследовательских подразделений Оренбургского государственного университета (ОГУ): институт микро- и нанотехнологий ОГУ, в структуре которого действует лаборатория синтеза наноструктур; лаборатория физики неорганических материалов и сред. Ранее сотрудниками лабораторий разработана и зарегистрирована специализированная база данных, содержащая детальные протоколы синтеза наночастиц [4]. В рамках подготовки данной работы автором было проведено исследование по интеркаляции наночастиц золота в монтмориллонитовую матрицу, результаты которого также лягут в основу наполнения базы [5]. Для расширения массива данных и исследования зависимостей планируется привлечь информацию из авторитетных внешних источников, в частности, из базы данных Springer Materials [6]. Такой комбинированный подход позволит сформировать обширную базу данных для обучения модели, минимизируя необходимость в дорогостоящих и длительных экспериментах.

Список литературы

1. Телекова, Л. Р. Синтез и исследование физико-химических свойств композитов золотые наночастицы-галлуазит / Л. Р. Телекова, М. В. Горбачевский, С. В. Филатова // Актуальные проблемы недропользования : Тезисы докладов XIX Всероссийской конференции-конкурса студентов и аспирантов, Санкт-Петербург, 12–16 апреля 2021 года. Том 2. – Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский горный университет, 2021. – С. 150-151. – EDN MFEMDZ.
2. Алюмоматричные композиты с малыми добавками наночастиц оксидных материалов / В. И. Костиков, Л. Е. Агуреев, Ж. В. Еремеева [и др.] // Перспективные материалы. – 2014. – № 7. – С. 13-20. – EDN SJBYEX.
3. Valášková M. et al. Structural and electrical properties of ceria nanoparticles on aluminosilicate matrices // Materials Today: Proceedings. – 2018. – Т. 5. – P. S96-S102.
4. Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2024625708 Российская Федерация. База методик синтеза наночастиц: № 2024625348: заявл. 18.11.2024: опубл. 04.12.2024 / С. А. Мирошников, С. Н. Летута, Д. А. Раздобреев [и др.]; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет». – EDN XWQAVA.
5. Макаров, В. Н. Ультразвуковая интеркаляция наночастиц золота в монтмориллонитовую матрицу / В. Н. Макаров, И. Р. Алимбеков, А. Р. Садыков // Первая Всероссийская конференция Керамические и керметные материалы: перспективные технологии и устройства КЕРМЕТТЕХ-2024, Екатеринбург, 10–11 сентября 2024 года. – Екатеринбург, 2024. – С. 114-117. – EDN JKTFIU.
6. Springer Materials: <https://materials.springer.com> – дата обращения 24.12.2025

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ МНЕМОНИЧЕСКОГО ПРИЕМА ДЛЯ ЗАПОМИНАНИЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ СПЕКТРАЛЬНЫХ СЕРИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Изучение спектра атома водорода является ключевым элементом в разделах «Квантовая механика» и «Атомная физика» в курсе общей физики для студентов технических и естественнонаучных направлений [1]. Традиционной трудностью при освоении этой темы является запоминание названий и строгой последовательности спектральных серий атома водорода: Лаймана, Бальмера, Пашена, Брэккета, Пфунда, Хэмпфри. Для студента этот ряд зачастую представляет собой абстрактный набор фамилий, не связанный с физической сущностью явления, что создает дополнительные барьеры при решении задач, например, на применение формулы Ридберга или постулатов Бора.

В качестве методического инструмента для решения данной проблемы предлагается комплексный мнемонический прием, состоящий из двух взаимодополняющих элементов. Первый мнемонический прием представляет собой фразу: «Лето Было Прекрасным, Будто Праздник. Хорошо». Ее структура формирует требуемую последовательность: начальные буквы слов соответствуют фамилиям ученых – Лайман (Лето), Бальмер (Было), Пашен (Прекрасным), Брэккет (Будто), Пфунд (Праздник), Хэмпфри (Хорошо). Дидактическая ценность данной фразы заключается не только в буквенной проекции. Эта фраза обладает позитивной эмоциональной окраской и формирует визуализируемый образ, что, вероятно, будет способствовать более глубокому и долговременному запоминанию за счет создания ассоциативных связей. Важным методическим достоинством приема является его адаптивность. Серия Хэмпфри часто выносится за рамки базового курса общей физики [1], поэтому завершающее слово фразы «Хорошо» может быть без ущерба для ее целостности опущено, сокращая ряд до пяти основных серий. Следует отметить, что предложенный мнемонический прием ранее в литературе не рассматривался [2-4].

Однако, важно подчеркнуть, что данная фраза имеет недостаток в виде повторяющихся букв в обозначении серий, поэтому может возникнуть затруднение в том, что обозначает буква «Б» – Бальмер или Брэккет, и «П» – Пашен или Пфунд. Для преодоления этого предлагается дополнительный алгоритмический прием, основанный на анализе второй буквы в названии серии и ее порядкового номера в алфавите. Для серий, начинающихся на «Б», используется правило – если вторая буква в «спорной» фамилии стоит первой, она же и первой является в мнемонической фразе. Тогда «БАльмер» характеризует первую «Б» в мнемонической фразе, а «БРэккет» – вторая «Б»

или четвертое слово во всей фразе. Аналогично для серий на «П»: «ПАшен» – характеризует первую «П» (или третье слово во фразе), а «ПФунд» – вторую, или пятую во всей фразе. Таким образом, вторые буквы «А» и «Р» для первой пары и «А» и «Ф» для второй становятся смысловыми маркерами, привязанными к фразе. Более того, для использования этого приема не нужно знать весь алфавит, стоит лишь запомнить, что буква «А» стоит первой. Студенту предлагается раздаточный материал в форме, представленной в таблице 1.

Таблица 1 – Раздаточный материал для студента

Номер в последовательности, n	Фамилии ученых	Фраза
1	Лайман	Лето
2	БАльмер	Было
3	ПАшен	Прекрасным
4	БРэкет	Будто
5	ПФунд	Праздник
6	Хэмпфри	Хорошо

Таким образом, предложенный мнемонический комплекс решает две последовательные задачи: сначала обеспечивает глобальное запоминание порядка серий через яркую образную фразу, а затем позволяет точно идентифицировать каждый ее элемент с помощью простого буквенного алгоритма. Разработанный прием основан на принципах ассоциативного кодирования информации и теории двойного кодирования А. Пайвио [5]. Он сочетает вербальный и образный компоненты для создания устойчивых ассоциативных связей в памяти. Прием является комплексным и включает два уровня: макроуровень (запоминание всей последовательности) и микроуровень (дифференциация сходных элементов).

Разработанный мнемонический комплекс был предварительно апробирован на студентах второго курса химического факультета. Наблюдение показало, что студенты, ознакомленные с приемом, при защите лабораторной работы уверенно и без ошибок воспроизводили порядок спектральных серий атома водорода. Эти предварительные данные указывают на практическую эффективность метода, хотя для строгих выводов требуется постановка контролируемого педагогического эксперимента.

В дальнейшем предполагается проведение контролируемого педагогического эксперимента для количественной оценки эффективности предложенного мнемонического комплекса. Эксперимент может быть организован в форме сравнительного исследования с контрольной и экспериментальной группами студентов, обучающихся по одной образовательной программе. В качестве показателей эффективности предполагается использовать точность и устойчивость воспроизведения последовательности спектральных серий атома водорода, а также скорость и

качество выполнения типовых задач с применением формулы Ридберга. Результаты такого эксперимента позволят уточнить педагогический потенциал предложенного метода и определить границы его применимости.

Список литературы

1. Савельев, И.В. Курс физики. В 3 томах. Том 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И. В. Савельев. – 9-е изд., стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2024. – 308 с.
2. Evans, R.L. Every good boy deserves fudge: The book of mnemonic devices / R. L. Evans. – New York: Penguin Group, 2007. – 240 p.
3. Горнова, Я.К. Использование мнемотехнических приемов при подготовке школьников к итоговой аттестации по физике / Горнова Я.К., Мерзлякова О.П. // Актуальные проблемы развития естественных наук: сборник статей участников XXV Областного конкурса научно-исследовательских работ «Научный Олимп» по направлению «Естественные науки». – Екатеринбург, – 2022. – С. 57-63.
4. Кулагина, О.Ю. Применение мнемотехники при обучении физике / О.Ю Кулагина // Самарский научный вестник. – 2013. – №. 4 (5). – С. 101-102.
5. Высоков, И. Е. Психология познания: учебник для вузов. – Москва: Издательство Юрайт, 2024. – 399 с.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ГИБРИДНОЙ ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОЙ НАНОСТРУКТУРЫ НА ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Многочисленные исследования посвящены изучению генерационных свойств растворов лазерных красителей, допированных различными наноматериалами. В частности, изучалось влияние на характеристики красителей полупроводниковых наночастиц (НЧ) оксида цинка (ZnO) [1], диэлектрических наночастиц диоксида кремния (SiO₂) [2], а также наночастиц других материалов и соединений. Результаты этих работ свидетельствуют о том, что комбинация молекул органического красителя (например, родамина) с наночастицами позволяет улучшить выходные параметры лазерного излучения коллоидного раствора. Дальнейшего повышения эффективности можно достичь, вводя в активную среду плазмонные наночастицы из благородных металлов [3], или биметаллические наноструктуры типа серебро/золото [4]. В таких системах благодаря локализованным плазмонным резонансам происходит значительное усиление электромагнитных полей, что ведет к повышению эффективности генерации.

Для интерпретации экспериментально наблюдаемого снижения порога генерации красителя, содержащего наночастицы серебра, в работе [5] предложена простая модель, описывающая спонтанное и вынужденное излучение молекул красителя в ближнем поле плазмонных наночастиц. Кроме того, проводятся теоретические исследования случайного лазера, сформированного из оптически прозрачной среды и рассеивающих активированных наночастиц.

Перспективным направлением разработки способов управления порогом генерации также является воздействие постоянного магнитного поля на гибридные системы, состоящие из излучателя и плазмонных наночастиц сферической или сфероидальной формы. Как продемонстрировано в [6], магнитное поле позволяет модулировать люминесцентный сигнал подобных наносистем. В исследовании [7] рассматривается возможность магнитного управления порогом генерации лазера путем внедрения в активную среду замагниченных однородных сферических металлических наночастиц и представлена соответствующая математическая модель одномодового лазера с трехуровневыми атомами и сферическими плазмонными рефлекторами.

Изучение генерационных свойств красителей имеет важное практическое значение для оптоэлектроники, сенсорики и солнечной энергетики, а также

способствует развитию технологий производства солнечных элементов и экологически чистых катализаторов для химической промышленности.

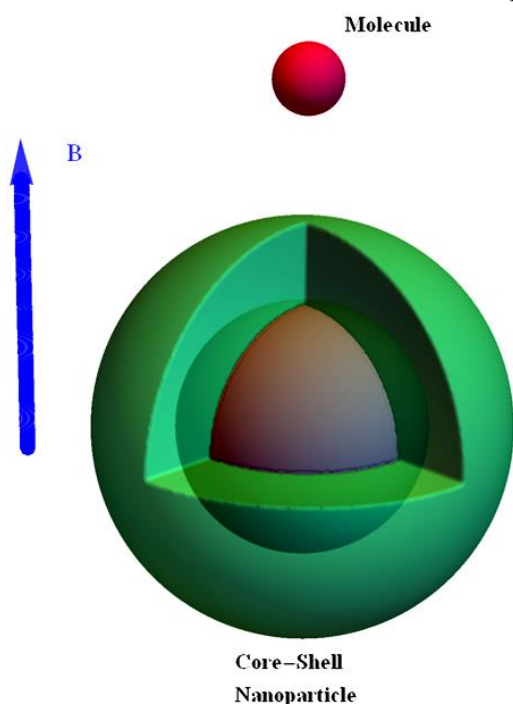


Рис. 1. Геометрическая конфигурация исследуемой системы

В данной работе объектом исследования является гибридная наносистема, состоящая из молекулы (трехуровневого атома) с дипольным моментом перехода \mathbf{p} на частоте ω_0 и слоистой наночастицы (рис. 1). НЧ образована из металлического ядра, в котором, под действием внешнего электрического поля образуются локализованные плазмоны, и оболочки из J-агрегатов, в которой, в свою очередь, возникают экситоны малого радиуса. Такая гибридная система может служить активным элементом нанолазера на красителях. При регулировании параметров гибридной системы из молекул и НЧ, появляется возможность управления ее безызлучательными и излучательными характеристиками. В отличие от системы с однородной НЧ и молекулой, оболочка из экситонного слоя на металлическом ядре позволяет более тонко регулировать параметры композита, так как дает дополнительные резонансные частоты в спектрах его излучения.

В качестве дополнительного метода регулирования пороговых значений генерации и мощности излучения лазера может быть использовано внешнее магнитное поле. Оно оказывает воздействие на плазмонные колебания в металлической компоненте НЧ, что, в свою очередь, влияет на процессы, протекающие в системе в целом. В рамках математического моделирования электродинамики НЧ индукция B магнитного поля вводится через ларморовскую частоту.

Для анизотропных сред некоторые скалярные величины записываются в тензорном виде. Так, например, для тензора $\vec{\alpha}$ дипольной поляризуемости слоистого композита с анизотропной сердцевиной получается следующее выражение [8]

$$\vec{\alpha}(\vec{\epsilon}_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = \left[(\vec{\epsilon}_1 + 2\epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3) + (\vec{\epsilon}_1 - \epsilon_2)(2\epsilon_2 + \epsilon_3)\xi^3 \right] \times \\ \times \left[(\vec{\epsilon}_1 + 2\epsilon_2)(\epsilon_2 + 2\epsilon_3) + 2(\vec{\epsilon}_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)\xi^3 \right]^{-1} R_2^3, \quad (1)$$

где R_1, R_2 – радиусы ядра НЧ и оболочки соответственно; $\xi = R_1/R_2$; $\vec{\epsilon}_1$ – тензор диэлектрической проницаемости анизотропного металла, зависящий от вектора индукции \mathbf{B} постоянного магнитного поля

$$\tilde{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2(\omega + i\gamma)}{\omega[(\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2]} & i \frac{\omega_p^2 \Omega_L}{\omega[(\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2]} & 0 \\ -i \frac{\omega_p^2 \Omega_L}{\omega[(\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2]} & \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2(\omega + i\gamma)}{\omega[(\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2]} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

Параметры ω_p и $\Omega_L = eB/m^*c$ – плазменная (ленгмюровская) и ларморовская частоты электронов соответственно; ω – частота электрического поля, γ – частота электронных столкновений (коэффициент диссипации), ε_∞ – высокочастотная часть диэлектрической проницаемости, учитывающая вклад ионного остова и межзонные переходы. ε_3 – скалярная диэлектрическая проницаемость среды, окружающей двухчастичную систему, ε_2 – диэлектрическая проницаемость внешнего (экситонного) слоя, определяемая выражением [8]

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_0 - f^2 / [(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{\text{exc}}^2]. \quad (3)$$

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 материала оболочки, обусловленная всеми другими электронными состояниями кроме экситонного, определяющего 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]

$$U(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}) = \frac{1}{2\hbar} \text{Im} \left[\mathbf{p} \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \vec{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \mathbf{p} \right]. \quad (4)$$

\mathbf{p} – вектор электронного дипольного момента перехода молекулы, $\vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) = r_0^{-3} (3\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \vec{\mathbf{I}})$ – квазистатическая диадическая функция Грина точечного дипольного источника, $\vec{\mathbf{I}}$ – единичная диада. Тензор $\vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0)$ 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, принимает следующий вид [7]

$$w_{sp}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \left[\vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \vec{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \right] \mathbf{p} \right|^2. \quad (5)$$

На основе выражений (1)-(5) были рассчитаны спектры скорости переноса энергии U и спонтанного испускания w_{sp} в гибридной системе с плазмон-экситонной структурой и молекулой.

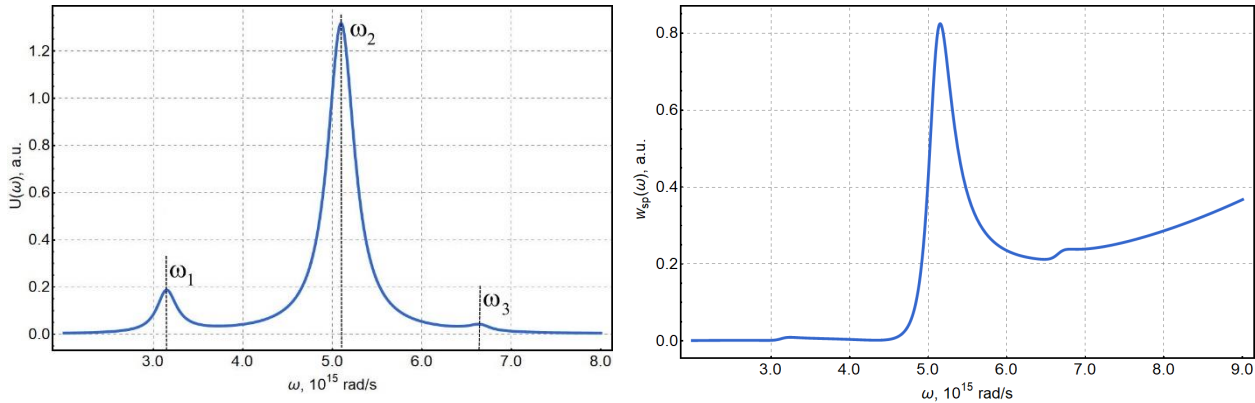


Рис. 2. Спектры скорости переноса энергии U от молекулы к слоистой НЧ и спонтанного испускания w_{sp} гибридной наноструктуры

На основании анализа полученных спектров были определены резонансные частоты. Как видно из рисунка 2, таких частот три: $\omega_1 = 3.1423 \cdot 10^{15}$, $\omega_2 = 5.0975 \cdot 10^{15}$, $\omega_3 = 6.66284 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$. Исследование влияния магнитного поля на спектральные характеристики U показало, что первая и третья спектральные полосы расщепляются на две компоненты при индукции магнитного поля B выше 5 Тл. Центральная полоса, напротив, оказалась нечувствительной к магнитному воздействию, за исключением незначительного уменьшения амплитуды второго пика. Учет магнитного поля осуществляется через ларморовскую частоту Ω_L , которая входит в тензор диэлектрической проницаемости металлического плазмонного ядра. Соответственно, влияние магнитного поля на экситоны, локализованные в оболочке наночастицы, учитывается опосредованно через плазмон-экситонное взаимодействие. На основании этих данных можно предположить, что центральный пик является преимущественно экситонным, в то время как два крайних пика являются экситон-плазмонными.

Скоростные (балансные) уравнения инверсии населенностей и фотонов трехуровневых атомов (ТУА) имеют вид [9]

$$\begin{aligned} \dot{n} &= -2bNn + \gamma_{\parallel} (n^{(0)} - n) \\ \dot{N} &= -2\kappa N + bV_a nN \end{aligned}, \quad (6)$$

где n – инверсия населенностей, $n^{(0)}$ – равновесная инверсия, N – число фотонов в резонаторе, $b = \sigma c / V$ – коэффициент, пропорциональный скорости вынужденного перехода с участием фотона, V – эффективный объем моды

резонатора, $\sigma = \hbar\omega W_{pump} / I$ – сечение поглощения фотона ТУА, c – скорость света, κ – скорость затухания фотонов в резонаторе, V_a – объем моды резонатора.

Эффективная скорость релаксации инверсии γ_{\parallel} выражается через скорость накачки W_{pump} и скорость релаксации $1/T_1$ с учетом радиационных w_{sp} и безызлучательных U каналов трансформации энергии ТУА [7]:

$$\gamma_{\parallel} = \frac{W_{pump}T_1 + 1}{T_1}, \quad \frac{1}{T_1} = w_{sp}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}) + U(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}), \quad n^{(0)} = \frac{W_{pump}T_1 - 1}{W_{pump}T_1 + 1} n_0,$$

n_0 – концентрация молекул.

Скорость накачки при возбуждении светом интенсивности I

$$W_{pump} = \frac{4\pi^2 |\mathbf{p}_{eff}|^2 I \cdot \cos^2 \beta}{\sqrt{\varepsilon_3} \hbar^2 c} \delta(\omega - \omega_0), \quad (7)$$

где ω – частота возбуждающего света, $\mathbf{p}_{eff} = [\vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \vec{\alpha}(\omega | \mathbf{B})] \mathbf{p}$, \mathbf{p} – переходный векторный дипольный момент в ТУА на частоте ω_0 ; ε_3 – диэлектрическая проницаемость активной среды с неактивированными ТУА, β – угол между векторами дипольного момента перехода молекулы и напряженности электрического поля накачки, δ – дельта функция Дирака, которая в расчетах заменялась спектральной функцией Лоренца.

Для порогового значения интенсивности накачки I_{th} , скорости накачки W_{th} и инверсии n_{th} получаем выражения с характерной зависимостью пороговых значений от индукции поля \mathbf{B} [7]

$$I_{th} = \hbar\omega \frac{W_{th}}{\sigma(\mathbf{B})} = \hbar\omega \frac{(n_0 + n_{th}) [w_{sp}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B}) + U(\mathbf{r}_0 | \mathbf{B})]}{(n_0 - n_{th}) \sigma(\mathbf{B})}, \quad (8)$$

$$W_{th} = \frac{n_0 + n_{th}}{n_0 - n_{th}} \frac{1}{T_1}, \quad (9)$$

$$n_{th} = n_{st} = 2\kappa / (bV_a). \quad (10)$$

Еще одним важным параметром лазера является мощность генерируемого им излучения P_{out}

$$P_{out} = 2\hbar\omega_0 \kappa N. \quad (11)$$

Выражение для определения числа фотонов N , генерируемых в резонаторе, получаем, решив первое уравнение (6) в стационарном состоянии

$$-2bNn + \gamma_{\parallel} (n^{(0)} - n) = 0,$$

$$N = \frac{1}{2bn} \frac{1}{T_1} \left[n_0 (W_{pump} T_1 - 1) - n_{th} (W_{pump} T_1 + 1) \right].$$

Установлено, что пороговые значения скорости накачки W_{th} и интенсивности накачки I_{th} демонстрируют различную зависимость от магнитного поля. Дополнительным регулирующим фактором, влияющим на пороговые значения генерации, являются частота экситонов ω_{exc} , сила осциллятора f и частота электрического поля ω . В ходе расчетов было установлено, что, подбирая определённые значения этих частот, можно как увеличить, так и уменьшить пороговые величины W_{th}, I_{th} .

Расчеты проведены при следующих значениях основных параметров, входящих в формулы: $R_1 = 10, R_2 = 20, r_0 = 23$ нм, $\omega_p = 13.87 \cdot 10^{15}, \omega_0 = 3.1 \cdot 10^{15}, \omega = 3.1423 \cdot 10^{15}, \gamma = 1.6 \cdot 10^{11}, \kappa = 4.24 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}, \varepsilon_3 = 1.5, \varepsilon_\infty = 3.7, p = 10 \text{ Д}, n_0 = 10^{14} \text{ см}^{-3}, V = 0.0054, V_a = 0.001 \text{ см}^3, I = 1.5 \cdot 10^{16} \text{ эрг}/(\text{с} \cdot \text{см}^2)$.

Как было сказано выше, влияние магнитного поля на исследуемую систему проявляется на частотах $\omega_1 = 3.1423 \cdot 10^{15}$ и $\omega_3 = 6.66284 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$. Для анализа зависимости пороговых значений генерации от магнитного поля расчеты были выполнены на указанных частотах. Однако, ввиду схожести характера изменения кривых, с единственным отличием в том, что пороговые значения, полученные на частоте ω_1 , были на порядок ниже по сравнению с результатами, полученными при использовании частоты ω_3 , дальнейшее представление данных осуществляется исключительно для частоты ω_1 .

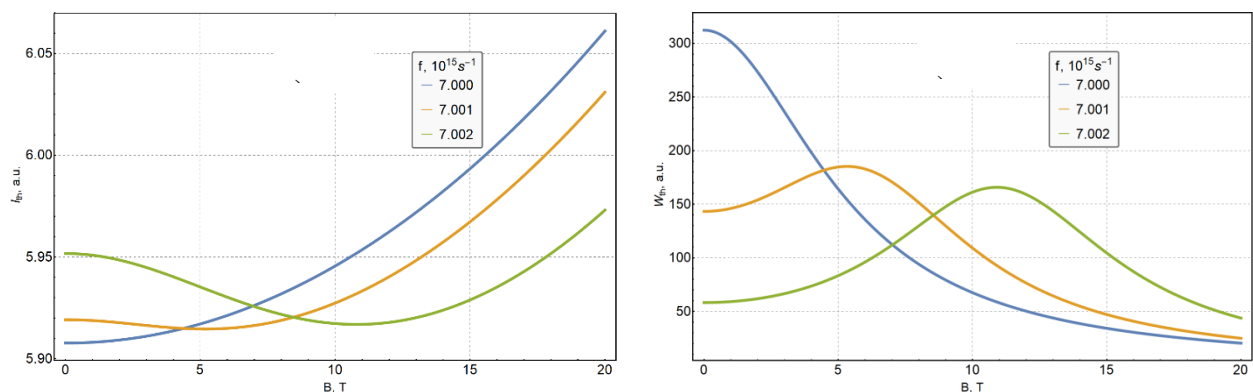


Рис. 3. Зависимость пороговых значений характеристик генерации лазера на красителе от индукции магнитного поля для различных величин силы осциллятора f

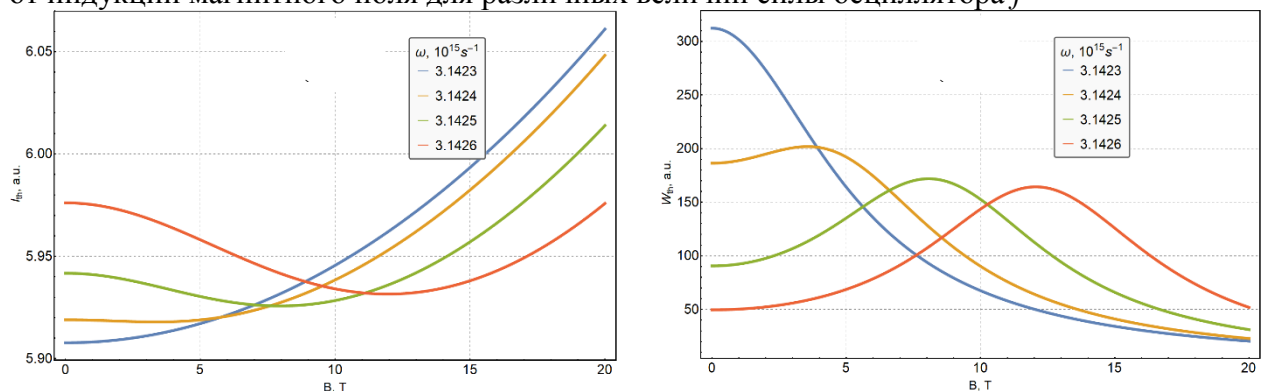


Рис. 4. Зависимость пороговых значений характеристик генерации лазера на красителе от величины индукции магнитного поля для различных частот электрического поля ω

Установлено, что пороговая интенсивность накачки I_{th} демонстрирует возрастающую зависимость от величины магнитной индукции B (рис. 3а). Данная зависимость подвержена модификации при варьировании частоты осциллятора f . В частности, при достижении частоты $f = 7.002 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ наблюдается немонотонный характер: в области индукций до $\approx 9 \text{ Тл}$ значение I_{th} снижается, тогда как при дальнейшем росте B следует ее увеличение. Аналогичное поведение I_{th} регистрируется в диапазоне частот ω от $3.1423 \cdot 10^{15}$ до $3.1426 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ (рис. 4а).

Пороговая скорость накачки W_{th} , в отличие от интенсивности I_{th} , при $f = 7.000 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ характеризуется монотонным уменьшением с ростом индукции магнитного поля. При увеличении частоты f зависимость $W_{th}(B)$ приобретает немонотонный вид с формированием максимума, положение которого ($\approx 6 \text{ Тл}$) смещается в сторону больших значений индукции. Схожая трансформация зависимости $W_{th}(B)$ отмечается и при изменении частоты ω (рис. 4б).

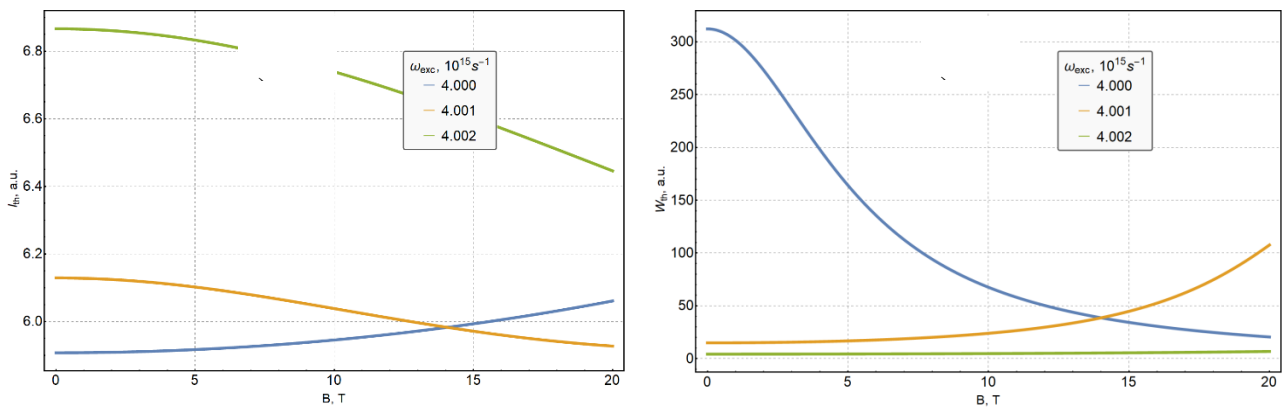


Рис. 5. Зависимость пороговых значений характеристик генерации лазера на красителе от величины индукции магнитного поля для различных частот ω_{exc} перехода, соответствующих центру полосы излучения для J-агрегата

Проведенное исследование демонстрирует, что варьирование экситонной частоты ω_{exc} в интервале от $4.000 \cdot 10^{15}$ до $4.002 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ обеспечивает возможность плавного управления пороговыми характеристиками генерации в замагниченной гибридной экситон-плазмонной наноструктуре, что представлено на рисунке 5.

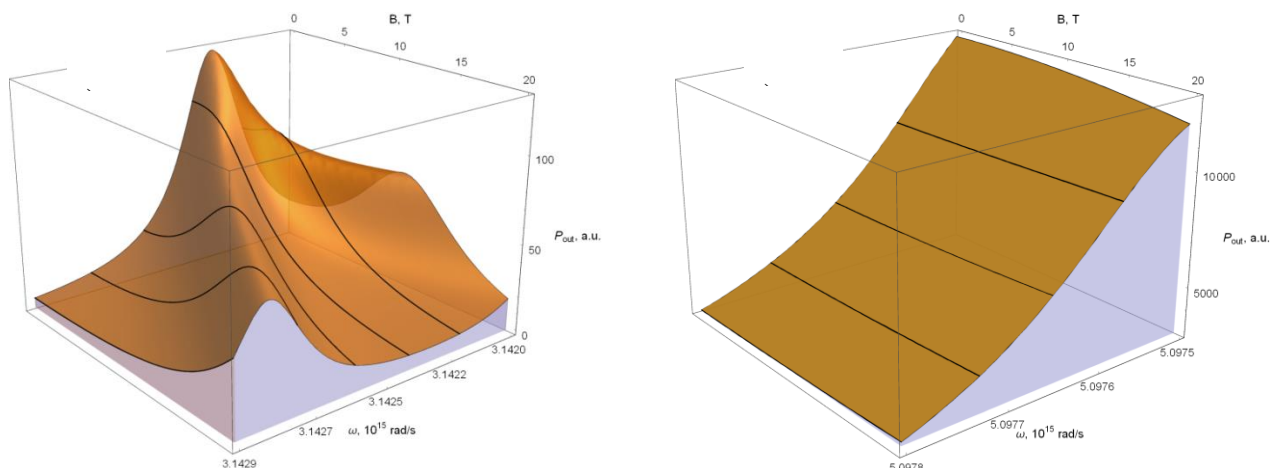


Рис. 6. Зависимость мощности излучения P_{out} лазера от величины индукции

магнитного поля и частоты ω электрического поля: а) $\omega_1 = 3.1423 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, б) $\omega_2 = 5.0975 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$

На резонансной частоте $\omega_1 = 3.1423 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ выходная мощность P_{out} лазера демонстрирует отрицательную зависимость от величины магнитной индукции B . Для получения положительной магнитной модуляции мощности излучения необходимо ввести девиацию частоты относительно ω_1 . При таком смещении частоты, как в меньшую, так и в большую сторону, величина P_{out} превосходит уровень, регистрируемый в нулевом магнитном поле (рис. 6а). Конкретно, при $\omega = 3.1420 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ увеличение магнитного поля до 10 Тл приводит к усилению P_{out} , тогда как при дальнейшем росте B выше этого значения наблюдается её спад. В случае $\omega = 3.1429 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ выходная мощность монотонно возрастает в исследуемом диапазоне полей от 0 до 20 Тл.

Для сравнения, на рис. 6б представлен случай использования резонансной частоты ω_2 . Зависимость $P_{out}(B)$ для данной частоты характеризуется индифферентностью к магнитному полю: величина выходной мощности остаётся практически постоянной при увеличении индукции B .

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технического развития 075-15-2024-550.

Список литературы

1. Markushev V. M., Ryzhkov M. V., Briskina S. M. Characteristic properties of ZnO random laser pumped by nanosecond pulses // Applied Physics B. – 2006. – Т. 84. – №. 1. – С. 333-337.
2. Ye L. et al. Coherent random lasing from liquid waveguide gain layer containing silica nanoparticles // Laser Physics Letters. – 2016. – Т. 13. – №. 10. – С. 105002.
3. Haddawi M. F., Jassim J. M., Hamidi S. M. Plasmonic multi-wavelength random laser by gold nanoparticles doped into glass substrate // Journal of Optics. – 2024. – Т. 53. – №. 2. – С. 876-882.
4. Ismail W. Z. W., Dawes J. M. Synthesis and characterization of silver-gold bimetallic nanoparticles for random lasing // Nanomaterials. – 2022. – Т. 12. – №. 4. – С. 607.
5. А.К. Зейниденов, Н.Х. Ибраев, М.Г. Кучеренко. Влияние наночастиц серебра на электронные переходы в молекулах красителей и генерационные характеристики жидкостных лазеров на их основе // Вестник ОГУ. – 2014. – № 9 (170). – С. 96.
6. Кучеренко М. Г., Налбандян В. М., Чмерева Т. М. Особенности формирования спектров излучения двухчастичных наносистем в магнитном поле // Оптика и спектроскопия. – 2022. – Т. 130. – №. 5. – С. 745-753.
7. Кучеренко М. Г., Налбандян В. М., Алимбеков И. Р. Влияние наночастиц на генерационные характеристики водного раствора родамина 6Ж.

Возможности магнитополевого управления // Оптика и спектроскопия. – 2025. – Т. 133. – №. 11. – С. 1211-1218.

8. Кучеренко М. Г., Налбандян В. М. Спектры поляризуемостей замагниченных слоистых нанокompозитов с анизотропной сердцевиной или оболочкой и локализованными поверхностными плазмонами // Оптический журнал. – 2018. – Т. 85. – №. 9. – С. 3-11.

9. Ханин Я. И. Лекции по квантовой радиофизике. – 2005.

СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛИПОСОМ С ИНКАПСУЛИРОВАННЫМИ АНТИБИОТИКАМИ

**Неясов П.П., Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Алимбеков И.Р., Раздобреев Д.А., канд. хим. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Современная фармакотерапия сталкивается с проблемами, связанными с низкой биодоступностью лекарственных веществ, выраженными побочными эффектами традиционных лекарственных форм и ростом антибиотикорезистентности микроорганизмов. В этих условиях возрастает значение подходов, направленных на повышение эффективности уже существующих препаратов за счёт оптимизации их доставки в организм.

Системы доставки лекарственных средств (drug delivery systems, DDS) являются важным направлением современной фармацевтической науки. Их использование позволяет обеспечить контролируемое высвобождение действующего вещества, повысить его локальную концентрацию и снизить системную токсичность. Среди различных DDS липосомальные системы занимают особое место благодаря универсальности и высокой биосовместимости [1].

Липосомы представляют собой везикулярные структуры, образованные фосфолипидными бислоями, окружающими водный внутренний объём. Амфифильная природа фосфолипидов обеспечивает возможность инкапсуляции как гидрофильных, так и гидрофобных соединений. Физико-химические параметры липосом, включая размер, поверхностный заряд и состав мембраны, существенно влияют на их биологические свойства и фармакокинетическое поведение [2].

Особое внимание в литературе уделяется использованию липосом для доставки антибиотиков. Инкапсуляция антибактериальных препаратов позволяет защитить их от инактивации, обеспечить пролонгированное высвобождение и повысить терапевтическую эффективность, в том числе при лечении инфекций, связанных с внутриклеточными патогенами и биоплёнками [2, 3].

Химическая природа антибиотиков определяет механизмы их включения в липосомальные системы. Норфлоксацин, относящийся к фторхинолонам, обладает амфотерными свойствами, а его ионизационное состояние зависит от рН среды, что влияет на характер взаимодействия с фосфолипидным бислоем [4]. Гентамицин является высокополярным аминогликозидным антибиотиком с поликатионным характером; его включение в липосомы осуществляется преимущественно за счёт электростатических взаимодействий и удержания во внутреннем водном объёме, при этом эффективность инкапсуляции зависит от условий синтеза [5].

Для исследования взаимодействия лекарственных веществ с липидными мембранами широко применяются физико-химические методы анализа, в частности инфракрасная спектроскопия. ИК-спектроскопия позволяет выявлять изменения колебательных характеристик функциональных групп, связанные с межмолекулярными взаимодействиями и перестройкой структуры системы, и используется для оценки включения лекарственных веществ в липосомальные структуры [6, 7].

Таким образом, липосомальные системы представляют собой перспективную платформу для доставки антибиотиков. Использование современных методов синтеза и физико-химических методов анализа позволяет целенаправленно регулировать свойства липосом и создавать лекарственные формы с улучшенными характеристиками. В данной работе рассматривается синтез липосом (рис. 1) с инкапсулированными антибиотиками с использованием микрофлюидной системы PreciGenome iFlow Touch и исследование их физико-химических свойств.

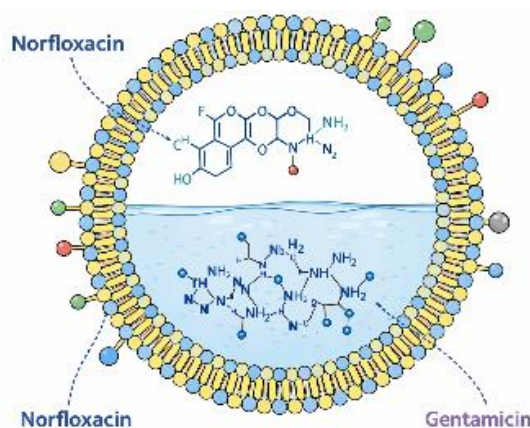


Рисунок 1 - Схематичное строение исследуемых липосом, инкапсулирующих норфлоксацин или гентамицин

Материалы и методы

В работе использовались следующие вещества: фосфотидилхолин (фосфолипид); поверхностно-активные вещества: диметилдидециламмоний бромид (DDAB, $C_{26}H_{56}BrN$) и олеат натрия ($NaC_{18}H_{33}O_2$); лекарственные препараты: гентамицин ($C_{21}H_{43}N_5O_7$), норфлоксацин ($C_{16}H_{18}FN_3O_3$), пропранолол; наночастицы магнетита Fe_3O_4 ; этанол (96%), деионизированная вода.

Для синтеза липосом использовалась микрофлюидная установка, включающая: микрофлюидный насос iFlow Touch PG-MFC-8CH; высокоскоростную систему визуализации PreciGenome PG-HSV-M; стеклянный микрофлюидный чип Dolomite Microfluidics с размером каналов 100 мкм.

Микрофлюидный подход обеспечивает быстрое и контролируемое смешение спиртовой и водной фаз, что способствует самосборке фосфолипидных везикул.

Синтез липосом, инкапсулирующих лекарственные препараты и магнитные наночастицы

1. Приготовление исходных растворов

Раствор 1 (спиртовая фаза): Фосфотидилхолин растворяли в 96% этаноле до концентрации 10 мг/мл. В раствор добавляли ПАВ (DDAB или олеат натрия) до концентрации 2.5 мг/мл, а также наночастицы Fe₃O₄ до концентрации 10 мг/мл. После полного растворения смесь фильтровали через нейлоновый фильтр (450 нм).

Раствор 2 (водная фаза): Лекарственный препарат (гентамицин или норфлоксацин) растворяли в деионизированной воде (25 г на 500 мл), после чего раствор фильтровали аналогичным образом.

2. Процесс микрофлюидного синтеза

Спиртовой раствор подавался в центральный канал микрофлюидного чипа со скоростью 10 мкл/мин, водный раствор — через боковые каналы со скоростью 70 мкл/мин. При контакте фаз происходила быстрая самосборка липосом с одновременной инкапсуляцией лекарственного препарата и магнитных наночастиц.

3. Удаление растворителя и хранение

Полученную суспензию липосом подвергали выпариванию в ротационном испарителе Heidolph Hei-VAP Value G3 при 50 °С в вакууме до удаления ~87,5% исходного объема спирта. Образцы хранили при температуре 5 °С.

Результаты и обсуждение

Анализ спектров поглощения

Спектры поглощения использовались для качественной и количественной оценки инкапсуляции лекарственных препаратов в липосомы. На рисунке 2 представлены спектры исходного водного раствора гентамицина и супернатанта раствора липосом, содержащих данный антибиотик.

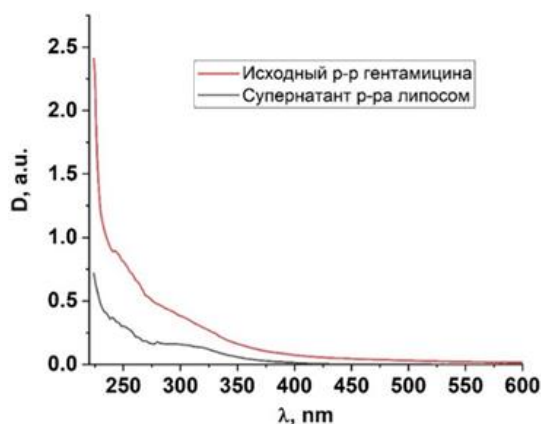


Рисунок 2 - Спектры поглощения исходного водного раствора гентамицина и супернатанта раствора липосом, содержащих данный препарат

Интенсивность поглощения супернатанта существенно ниже по сравнению с исходным раствором, что указывает на снижение концентрации свободного гентамицина в водной фазе вследствие его инкапсуляции в липосомы. Концентрацию антибиотика в супернатанте определяли по калибровочной зависимости «оптическая плотность – концентрация», построенной в соответствии с законом Бугера–Ламберта–Бера.

Эффективность инкапсуляции (EE) рассчитывали по стандартному соотношению между исходной концентрацией препарата и его концентрацией в супернатанте:

$$EE = \frac{c_0 - c_c}{c_0} \cdot 100\%$$

Для гентамицина значение EE составило 76 %, что свидетельствует о высокой эффективности микрофлюидного метода синтеза липосом. Аналогичный подход был применён для других препаратов; результаты приведены в таблице 1. Во всех случаях достигнуты значения EE выше 60 %, что подтверждает универсальность используемой методики для соединений различной природы.

Таблица 1 - Эффективности инкапсуляции липосомами различных препаратов

Препарат	C_0 , мг/мл (исходная концентрация)	C_c , мг/мл (концентрация препарата в супернатанте)	EE , % (эффективность инкапсуляции)
Гентамицин	50	12	76
Норфлоксацин	50	15	70
Пропранолол	5	1.8	64

Результаты динамического рассеяния света

Метод динамического рассеяния света применялся для определения гидродинамического диаметра липосом, распределения по размерам и дзета-потенциала. Липосомы, инкапсулирующие гентамицин и норфлоксацин совместно с наночастицами Fe_3O_4 (рис. 3), характеризуются размерами в субмикронном диапазоне.

Полученные распределения по размерам имеют умеренную полидисперсность ($PDI > 0.1$), однако остаются в пределах, допустимых для устойчивых липосомальных суспензий. Сравнение систем показывает, что природа инкапсулируемого препарата влияет на ширину распределения. Для гентамицина, являющегося гидрофильным соединением, наблюдается формирование более компактных и относительно однородных везикул, тогда как в случае норфлоксацина возможно более выраженное взаимодействие препарата с липидным бислоем, приводящее к увеличению полидисперсности.

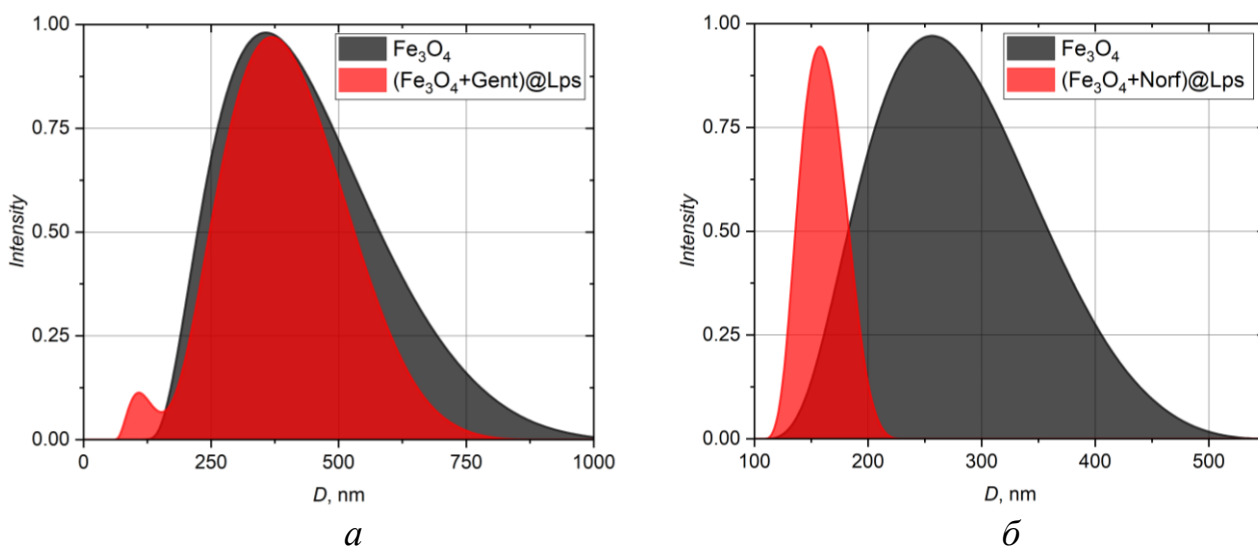


Рисунок 3 – Распределения по размерам липосом, инкапсулированных лекарственными препаратами (*a* – гентамицин, *б* – норфлоксацин) и ферромагнитными наночастицами (Fe_3O_4)

На рисунке 4*a* представлены распределения по размерам липосом, стабилизированных различными поверхностно-активными веществами. Во всех системах формируются частицы субмикронного размера, однако использование катионного ПАВ DDAB приводит к появлению более мелких липосом по сравнению с анионным стабилизатором NaOl. Это указывает на более эффективную электростатическую стабилизацию липосом в присутствии DDAB.

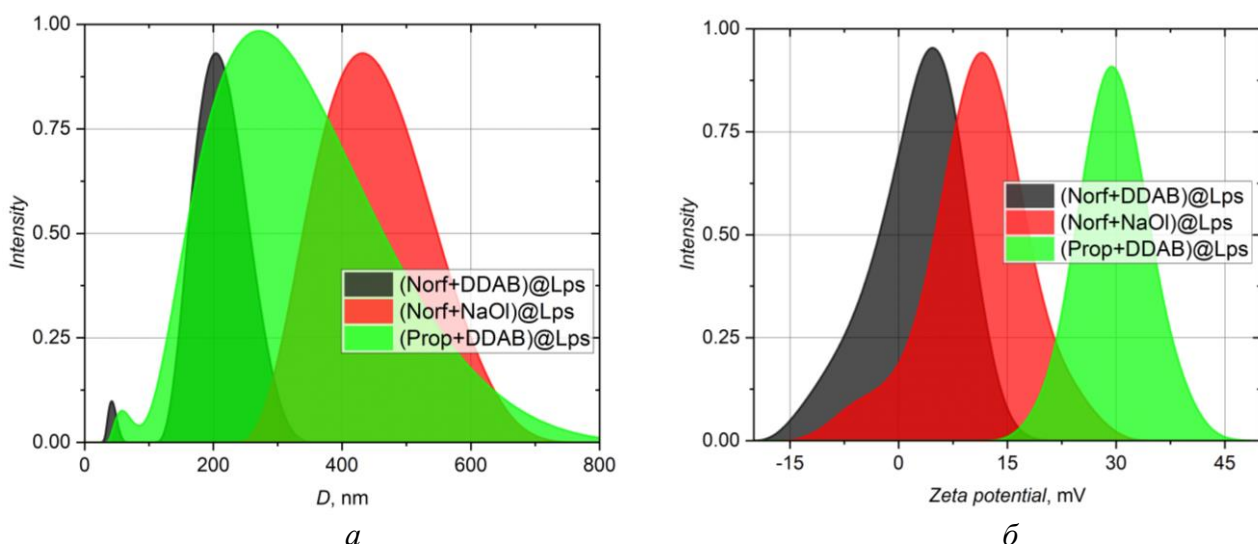


Рисунок 4 – Результаты ДРС. Распределения по размерам липосом, инкапсулированных различными лекарственными препаратами и стабилизированными различными ПАВ (*a*).

Распределения по дзета потенциалам полученных везикул (*б*). • – норфлоксацин+DDAB, • – норфлоксацин+NaOl, • - пропранолол+DDAB

Распределения по дзета-потенциалу (рис. 4*б*) демонстрируют, что липосомы, стабилизированные DDAB и NaOl, обладают положительным поверхностным зарядом, обеспечивающим высокую коллоидную устойчивость.

Для системы норфлоксацин+DDAB характерны меньшие значения ζ -потенциала, однако использование в качестве стабилизатора NaOI приводит к увеличению значения поверхностного потенциала, что согласуется с анионной природой стабилизатора. Обобщённые данные по размерам и дзета-потенциалу приведены в таблице 2.

Таблица 2 - Табличное обобщение результатов

Система	Размер, нм	Дзета-потенциал, мВ	Стабильность
Гентамицин+DDAB	~250	+30	Высокая
Норфлоксацин+DDAB	~200	+5	Низкая
Норфлоксацин+NaOI	~430	+12	Средняя
Пропранолол+DDAB	~290	+29	Высокая

На рисунке 5 показана зависимость дзета-потенциала липосом, стабилизированных DDAB, от pH среды. В кислой области (pH≈2–4) ζ -потенциал принимает высокие положительные значения (+55...+63 мВ), что соответствует высокой электростатической устойчивости системы. При увеличении pH наблюдается монотонное снижение ζ -потенциала с переходом через изоэлектрическую точку при pH=6.864.

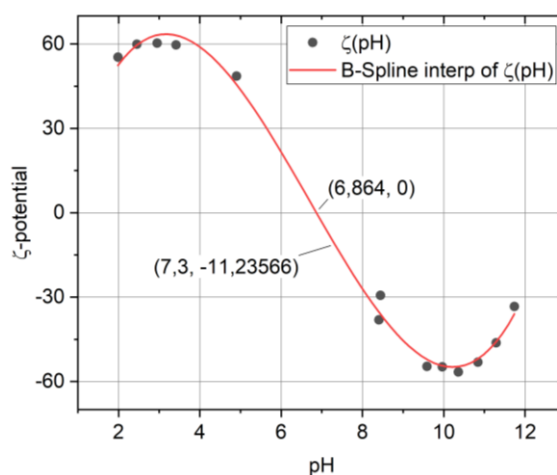


Рисунок 5 – Кривая зависимости дзета-потенциала липосом стабилизированных DDAB от pH среды

В слабощелочной и щелочной областях заряд липосом становится отрицательным; минимум ζ -потенциала (≈ -60 мВ) наблюдается при pH≈10–10.5. При дальнейшем росте pH модуль ζ -потенциала уменьшается, однако знак остаётся отрицательным. Таким образом, система характеризуется инверсией поверхностного заряда, а минимальная коллоидная устойчивость ожидается вблизи изоэлектрической точки.

Интерпретация ИК-спектров

ИК-Фурье спектры использовались для анализа взаимодействия фосфотидилхолина с инкапсулируемыми препаратами. Для систем

гентамицин–фосфотидилхолин (рис. 6) и норфлоксацин–фосфотидилхолин (рис. 7) наблюдаются изменения интенсивности и положения полос, соответствующих функциональным группам липида и препаратов.

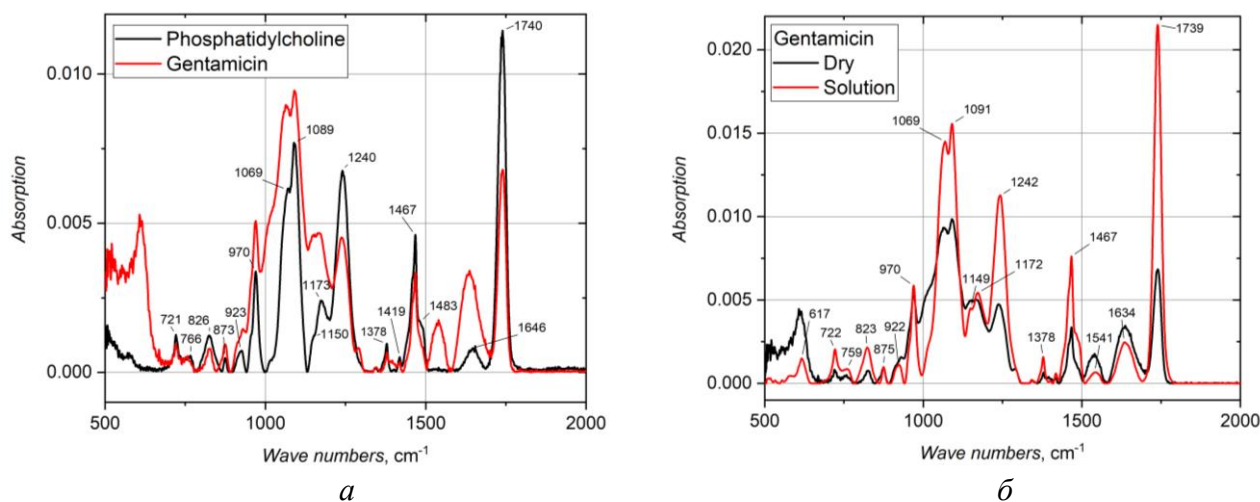


Рисунок 6 - ИК-спектры фосфотидилхолина (•) и смеси (•) гентамицин+фосфотидилхолин (а), спектры сухой смеси гентамицин+фосфотидилхолин (•) и смеси (•), полученной после растворения гентамицина и фосфотидилхолина в водно-спиртовой среде (б)

Для гентамицина выявлены признаки водородного и ионного взаимодействия аминных и гидроксильных групп антибиотика с карбонильными и фосфатными группами фосфолипида. Для норфлоксацина изменения спектров указывают на его взаимодействие с полярной областью липидного бислоя и возможную частичную ассоциацию с межфазной областью мембраны. Отличия между спектрами сухих и растворённых смесей подтверждают перестройку системы межмолекулярных взаимодействий при формировании липосомальных структур.

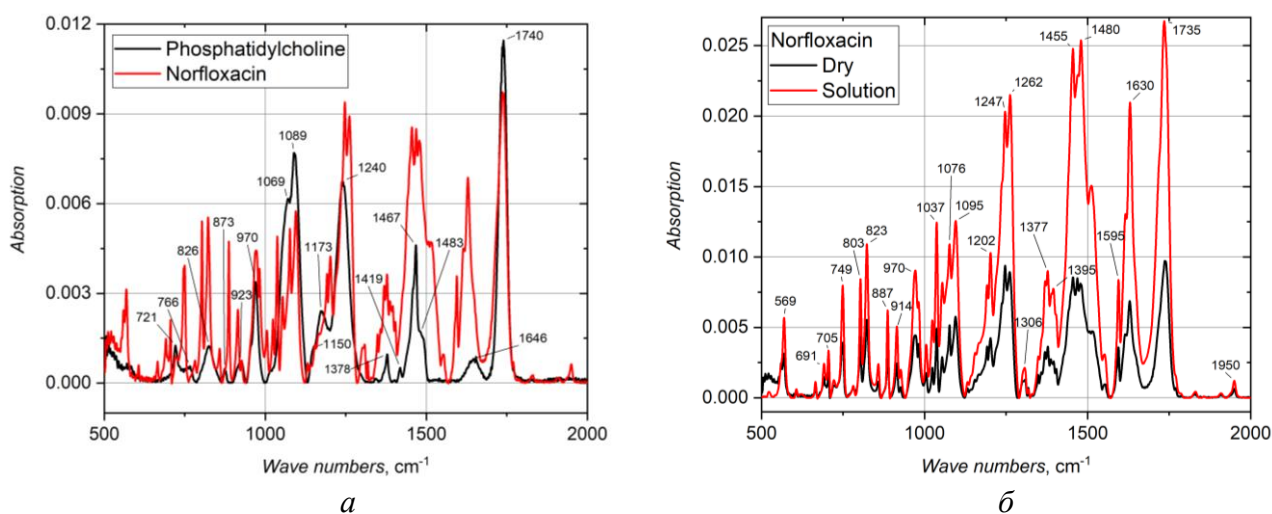


Рисунок 7 - ИК-спектры фосфотидилхолина (•) и смеси (•) норфлоксацин+фосфотидилхолин (а), спектры сухой смеси норфлоксацин+фосфотидилхолин (•) и смеси (•), полученной после растворения норфлоксацина и фосфотидилхолина в водно-спиртовой среде (б)

Заключение

В работе показана эффективность микрофлюидного метода получения липосом с инкапсулированными лекарственными препаратами различной природы. Спектрофотометрический анализ подтвердил высокую эффективность инкапсуляции (64–76 %). По данным динамического рассеяния света сформированы устойчивые липосомы субмикронного размера, параметры которых зависят от состава и типа стабилизатора. Исследование дзета-потенциала, включая его зависимость от рН, выявило инверсию поверхностного заряда и области пониженной коллоидной устойчивости. Анализ ИК-спектров подтвердил наличие межмолекулярных взаимодействий между препаратами и фосфолипидами, участвующих в формировании липосомальной структуры.

Список литературы

1. Drulis-Kawa Z., Dorotkiewicz-Jach A. Liposomes as delivery systems for antibiotics // *International Journal of Pharmaceutics*, 2010, 387, 1-2, pp. 187-198. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2009.11.033>.
2. Ferreira M. et al., Liposomes as Antibiotic Delivery Systems: A Promising Nanotechnological Strategy against Antimicrobial Resistance // *Molecules*, 2021, 26, 7, pp. 2047. <https://doi.org/10.3390/molecules26072047>.
3. Zabielska-Koczywaś K., Lechowski R. The Use of Liposomes and Nanoparticles as Drug Delivery Systems to Improve Cancer Treatment in Dogs and Cats // *Molecules*, 2017, 22, 12, pp. 2167. <https://doi.org/10.3390/molecules22122167>.
4. Forward et al. Comparative activities of norfloxacin and fifteen other antipseudomonal agents against gentamicin-susceptible and -resistant *Pseudomonas aeruginosa* strains // *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 1983, 24, 4, pp. 602-604. <https://doi.org/10.1128/AAC.24.4.602>.
5. King et al. In vitro antibacterial activity of norfloxacin (MK-0366) // *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 1982, 21, 4, pp. 604-607. <https://doi.org/10.1128/AAC.21.4.604>.
6. Socrates G. Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies: Tables and Charts, 3rd Edition // Wiley, 2004, 368 p. ISBN: 978-0-470-09307-8.
7. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., Bryce D.L. Spectrometric Identification of Organic Compounds, 8th Edition // Wiley, 2015, 464 p. ISBN: 978-1-119-09306-0.

МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ В КИТАЙСКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКЕ

**Огерчук А.А., канд. пед. наук,
Анисина И.Н., канд. техн. наук**

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

Сопоставление национальных моделей преподавания физики и астрономии в разных странах является актуальным, поскольку на физическом факультете ОГУ в настоящее время разрабатывается цикл лекций на английском языке для китайских студентов, и для его проектирования важно понимать, каким школьным и культурно-методическим опытом обладают обучающиеся из КНР. При этом зарубежные обзоры подчёркивают, что международный обмен опытом ускоряет обновление содержания и методик, формируя профессиональные сообщества преподавателей и общий язык обсуждения дидактических решений [1].

Цель данной статьи – обобщить особенности преподавания физики и астрономии в Китайской народной республике и сопоставить их с тенденциями развития педагогического образования и профессионально-методической подготовки учителей физики, описанными в зарубежных исследованиях.

Задачи исследования:

- 1) описать организацию учебного процесса и содержание курса физики и астрономии в школах КНР [2];
- 2) выделить типовые методические акценты (теория/эксперимент, связь с практикой, роль экзаменов) и сравнить их с международными подходами [1];
- 3) обозначить современные сдвиги: рост доли практикумов, цифровых инструментов и элементов искусственного интеллекта (ИИ) в образовании [3,4].

Многочисленные исследования в области методики преподавания физики, проведенные в разных странах, отмечают важность изучения международного опыта для развития физического образования. Например, в исследовании [1] подчеркивается, что международный обмен опытом не только обогащает знания преподавателей, но и способствует формированию профессиональных сообществ, которые поддерживают непрерывное развитие педагогических компетенций.

В обзорах по методике преподавания физики обычно выделяют несколько традиционных целей обучения [1]:

- естественнонаучная и техническая грамотность: понимание ключевых законов и базовых понятий, необходимых для объяснения явлений окружающего мира;
- развитие научного мышления: умение формулировать гипотезы, строить объяснения и проверять их на основе данных и моделей;

- готовность применять физические модели и расчёты при решении учебных и профессиональных задач, включая оценку ограничений применимости моделей;
- формирование целостной естественно- научной картины мира и навыков принятия обоснованных решений в ситуациях, где требуется опора на научные аргументы.

Отдельные образовательные системы расставляют разные приоритеты. Так, в англоязычной традиции часто акцентируют понимание физических смыслов и работу с типичными «наивными» представлениями учащихся, а во французских курсах заметна склонность к систематизации задач по типам после изучения темы; во многих программах также широко используются задания, построенные вокруг экспериментальных ситуаций и обработки результатов измерений [1].

Китайская школа исторически опиралась на сильную теоретико-математическую линию: детальная работа с формулами, строгое введение понятий и регулярная тренировка вычислительных навыков. Одновременно важным драйвером содержания и форматов обучения остаются «высокоставочные» экзамены (в первую очередь гаокао), что стимулирует массовую отработку типовых форматов заданий и чётких алгоритмов решения [2,5,7].

По описаниям в профильной литературе, систематическое изучение физики в КНР начинается в среднем звене (примерно с 7 класса), а астрономические темы часто включаются в курс физики; в старшей школе возможны элективы или расширенные модули по астрономии в рамках естественнонаучного профиля [2].

В старших классах более заметна интеграция математического аппарата (в том числе элементов анализа) в курс физики. Производная используется, например, при описании скорости и ускорения как производных перемещения, в анализе изменения величин во времени, в задачах по переменному току и электромагнитным процессам, а также в термодинамических моделях [2].

Другие отличия подходов обучения физики и астрономии приведены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнительный анализ подходов обучения физики и астрономии.

Аспект	Зарубежные страны (в целом)	Китай
<i>Акцент в обучении</i>	Связь с реальной жизнью, использование практических примеров из повседневной жизни	Теоретические законы и математические расчёты
<i>Роль экспериментов</i>	Широко используются лабораторные работы,	До недавнего времени эксперимент часто

	демонстрационные опыты, акцент на практическом применении знаний	оставался теоретическим, но в последние десятилетия роль практических занятий растёт
Цель обучения	Развитие критического мышления, умение применять знания в реальных ситуациях, формирование естественнонаучной грамотности	Подготовка квалифицированных специалистов, усвоение теоретических основ, успешная сдача экзаменов
Методы обучения	Активное использование проектов, групповых работ, технологий для развития критического мышления	Традиционно – лекции и индивидуальные занятия, но в последние годы внедряются инновационные методы

Таким образом, если в многих зарубежных странах акцент делается на прикладном характере физики и развитии soft skills, то в Китае традиционно преобладает теоретическая подготовка с постепенно усиливающимся практическим компонентом.

В последние десятилетия в китайской системе заметны шаги к усилению практической составляющей: расширяется набор лабораторных работ, появляются мультимедийные ресурсы и цифровые инструменты, которые дополняют традиционную теоретическую подготовку [2].

Тема цифровой трансформации и использования ИИ в образовании закрепляется и на уровне государственной политики. В частности, в 2025 году Министерство образования КНР публично обозначало запуск и развитие инициатив «Smart Education of China 2.0» с расширенными ИИ-функциями как часть национальной стратегии цифрового образования [3]. В аналитических обзорах политики «Education Informatization 2.0» также подчёркивается роль облачных сервисов и ИИ для персонализации обучения и управления образовательными данными [4].

Подготовка учителей физики и астрономии в разных странах всё чаще строится вокруг связки «предметные знания – методика – практика», где практико-ориентированные модули и рефлексия рассматриваются как ключевые элементы профессионального роста [5]. Для китайского контекста в профильных публикациях также подчёркиваются высокая организованность подготовки и внимание к созданию учебных материалов и демонстрационного оборудования, включая изготовление простых установок из доступных материалов [2].

Сопоставление подходов показывает, что при общем наборе целей (грамотность, научное мышление, перенос знаний) различаются акценты: в ряде зарубежных систем сильнее выражены прикладные сценарии и обсуждение экспериментальных данных, тогда как в КНР долгое время доминировала теоретико-математическая линия, тесно связанная с экзаменационной логикой [1,2,6]. Текущие реформы и цифровизация сдвигают баланс в сторону практикумов и более гибких форм обучения, включая использование цифровых платформ и ИИ-инструментов [3,4].

Список литературы

1. Зенцова И. М. Зарубежный опыт в области методики преподавания физики // Бизнес. Образование. Право. 2022. № 3 (60). С. 327–331. DOI: 10.25683/VOLBI.2022.60.317.
2. Милинский А.Ю. Особенности преподавания физики в Китае // Проблемы современного педагогического образования. 2024. №85-2. <https://cyberleninka.ru/article/n/osobennosti-prepodavaniya-fiziki-v-kitae>
3. Ministry of Education of the People's Republic of China. MOE outlines 2025 national strategy for digital education. 2025. https://en.moe.gov.cn/news/press_releases/202504/t20250403_1186060.html
4. Yan, S. Education Informatization 2.0 in China: Motivation, Framework and Vision. ECNU Review of Education. 2021. <https://files.eric.ed.gov/fulltext/EJ1301603.pdf>
5. Евстафьева КС. Практическая подготовка будущего учителя физики в высших учебных заведениях за рубежом. УО [Интернет]. 15 ноябрь 2024 г. [цитируется по 22 январь 2026 г.]; 14(11-1):260-7. доступно на: <https://emreview.ru/index.php/emr/article/view/1869>
6. Han, C., Xiang, J. Alignment Analysis Between China College Entrance Examination Physics Test and Curriculum Standard Based on E-SEC Model. Int J of Sci and Math Educ 23, 215–234 (2025). <https://doi.org/10.1007/s10763-024-10468-0>
7. Wang, C. Analysis of visual-based physics questions of the senior high school entrance examination in China / C. Wang, B. Wei // Phys. Rev. Phys. Educ. Res. – 2024. – V. 20. – P. 010112.

ПЕРЕДАЧА ЭНЕРГИИ ТРИПЛЕТНЫХ ЭКСИТОНОВ МЕЖДУ МОЛЕКУЛЯРНЫМ НАНОКРИСТАЛЛОМ И АДСОРБИРОВАННОЙ НА НЕМ ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПЬЮ

**Пеньков С.А., канд. физ.-мат. наук
Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Передача и перераспределение энергии в форме электронного возбуждения между молекулами происходит по-разному в средах содержащих наночастицы (НЧ) различного типа. Изменение материала и размера этих наночастиц приводит к изменению параметров передачи энергии [1]. Ранее было показано, что бимолекулярные спин-селективные процессы подобные триплет-триплетной аннигиляции, происходящие в наноструктурах, чувствительны к их размерам и деталям строения этих структур [2].

Заключение наночастиц в полимерную оболочку является одним из наиболее удобных приемов для реализации управления свойствами наночастиц. Эта процедура делает композитные НЧ уникальными объектами нанопотоники и органической оптоэлектроники [3,4]. В связи с этим, интерес представляют, в частности, гибридные наноструктуры, в которых одним из компонентов наночастицы является молекулярный кристалл из ряда полициклических углеводов (антрацен, тетрацен, пентацен), а оболочка образована π -сопряженными полимерами класса полифениленвиниленов (PPV), поли(3-гексилтеофена) (P3HT), или же полифлуоренов [5]. При образовании триплетного экситона в кристаллическом ядре композита возможна эффективная передача энергии к полимерной оболочке посредством ее транспорта по молекулярному кристаллу. Высокая степень трансформации энергии в такой системе может быть достигнута подбором наиболее оптимального сочетания ядро-полимерная оболочка, с учетом подходящих значений времен жизни и подвижности триплетного экситона.

Наряду с этим, интерес представляют наноструктуры, построенные на основе такого же ядра из полициклических углеводов с макроцепной оболочкой из прозрачного полимера - диэлектрика с внедренными триплетными сенсбилизаторами или тушителями T-экситонов. Специфической особенностью в этом случае становится затрудненная миграция энергии триплетов в оболочке. Однако появляется гораздо более богатый выбор претендентов среди триплетных сенсбилизаторов по сравнению π -сопряженными полимерами.

По этой причине, большое значение имеет анализ миграции и превращения энергии электронного возбуждения в таких наноструктурированных системах с детальными расчетами скоростей бимолекулярных фотореакций - основного показателя эффективности миграции и превращения энергии.

В данной работе, на основе ранее предложенной модели [6], проведены расчеты скорости распада T-экситонного состояния в системе «сферическая наночастица радиуса R в полимерной оболочке с центрами тушения Q ».

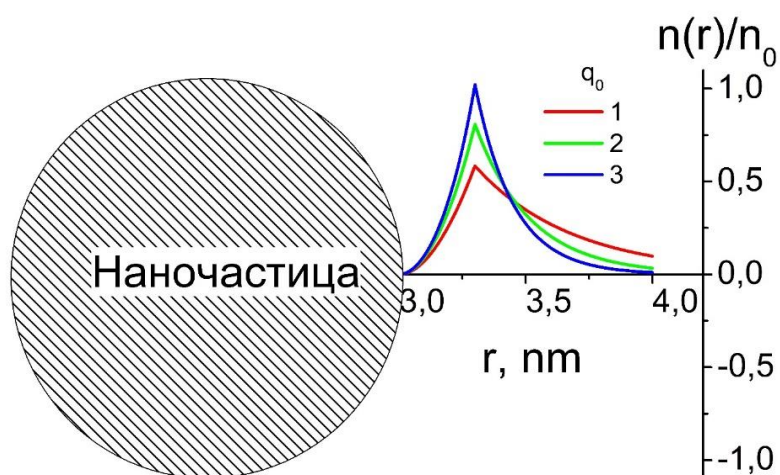


Рисунок 1 - Сферическая наночастица молекулярного кристалла и радиальное распределение плотности звеньев полимерной цепи, адсорбированной на ее поверхности.

Расчеты распределения звеньев полимерной цепи были проведены, с использованием модели потенциального поля «твердая стенка – дельта-функциональная яма», на основе следующего выражения [6]:

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

Функции $F_0^I(r)$ и $F_0^{II}(r)$, каждая на своем интервале, определяют равновесные конфигурации адсорбированной полимерной цепи, а плотность $n(r)$ звеньев полимера связана с ними соотношением $f(r) = (F_0^{I,II}(r))^2$, $n(r) = n_0 f(r)$. Здесь, в (1), $I_{1/2}(q_0 r)$, $K_{1/2}(q_0 r)$ представляют собой функции Бесселя мнимого аргумента, A_0 , q_0 – константы.

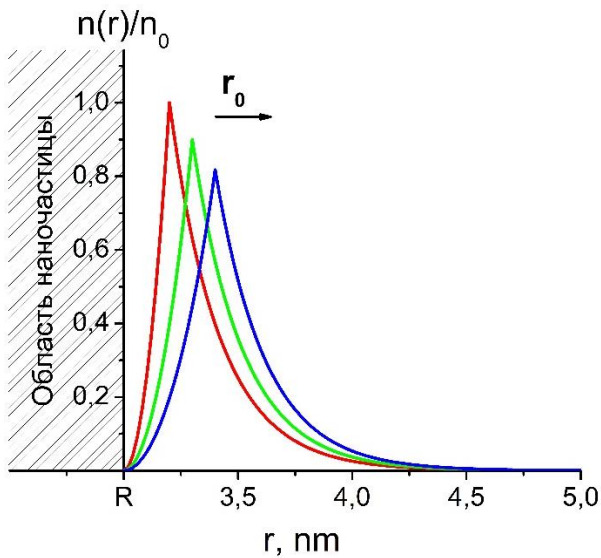


Рисунок 2 - Графики распределения плотности мономерных звеньев, соответствующие равновесной конфигурации адсорбированной макроцепи при различных значениях положения r_0 приповерхностной потенциальной ямы. 1 – 3,2; 2 – 3,3; 3 – 3,4 нм.

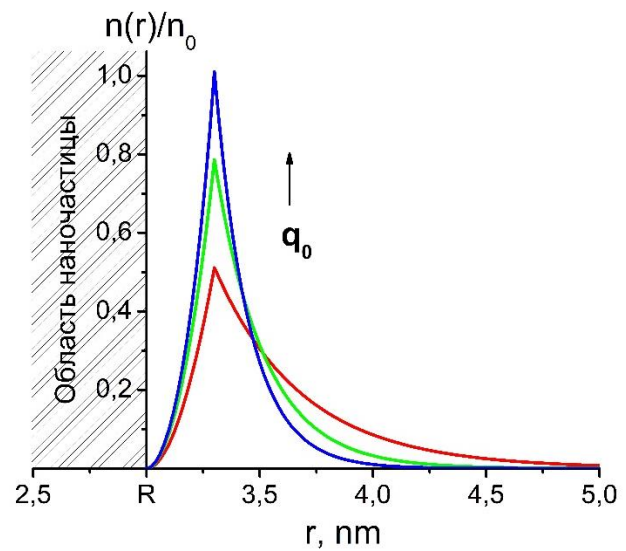


Рисунок 3 - Графики распределения плотности мономерных звеньев, соответствующие равновесной конфигурации адсорбированной макроцепи при различных значениях параметра q_0 . 1 – 1; 2 – 1,1; 3 – 1,2 нм⁻¹.

В предложенной ранее модели [6] вводилось понятие Q-центров, т.е. молекулярных центров тушения. Такими центрами тушения могут служить либо привнесенные в оболочку молекулы, либо участки полимерных цепей в возбужденном триплетном, или в невозбужденном синглетном (дублетном) состоянии.

Согласно модели [6], не зависящая от спина скорость распада T-возбуждения с учетом конечного времени жизни T-экситона, дается выражением:

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

Данное выражение записано для случая, когда триплетный экситон, принадлежащий сферическому молекулярному нанокристаллу, локализованный в его центре, взаимодействует сферически симметрично с Q-центрами, находящимися вне нанокристалла, т.е. на расстояниях $r > R$.

Перепишем выражение (2) в следующем виде:

$$\Gamma(0,t) \tau_T - 1 = \tau_T n_Q \int_R^{\infty} f(r)U(r)\exp[-U(r)t]4\pi r^2 dr \quad (3)$$

Выражение (3) позволяет рассматривать более удобную для анализа безразмерную величину $\Gamma(0,t) \tau_T - 1$, отвечающую лишь за скорость распада одиночного T-экситона, без учета его времени жизни.

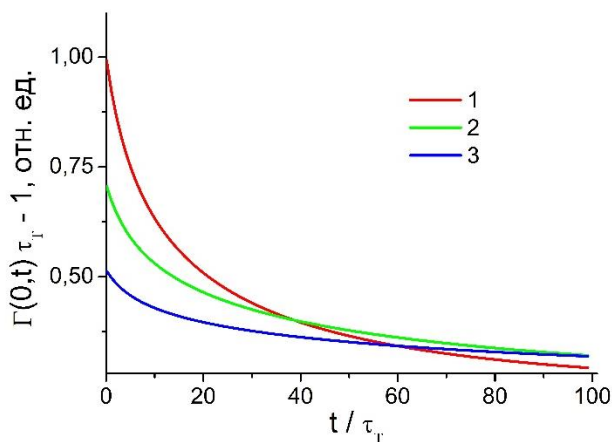


Рисунок 4 - Скорость распада T-возбуждения (3) без учета мономолекулярной дезактивации при различных значениях r_0 . 1 – 3,2 нм; 2 – 3,3 нм; 3 – 3,4 нм. Радиус наночастицы $R=3$ нм.

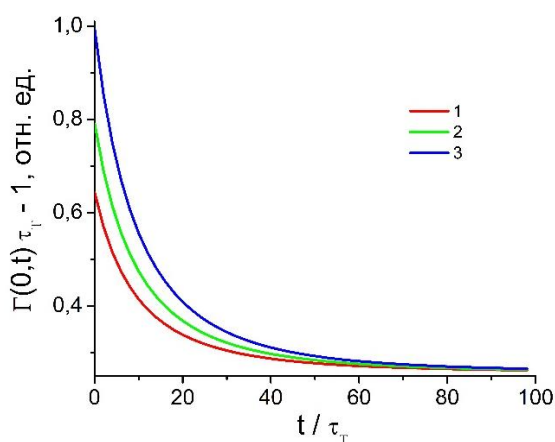


Рисунок 5 - Скорость распада T-экситона (3) без учета мономолекулярной дезактивации при различных значениях q_0 . 1 – 1, 2 – 1,1, 3 – 1,2 нм⁻¹, $R=3$ нм.

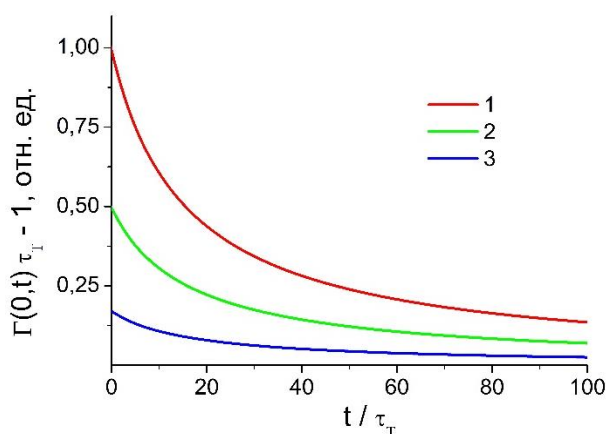


Рисунок 6 - Скорость распада T-экситона (3) без учета мономолекулярной дезактивации при различных значениях радиуса R нанокристалла. 1 – 3; 2 – 2,5; 3 – 2 нм. $(R - r_0) = 0.4$ нм, $q_0 = 1$ нм⁻¹.

На рисунках 4-6 представлены результаты расчета скорости распада T-возбуждения за вычетом скорости собственного моноцентрового распада триплетного состояния. Расчеты производились с целью установления характера влияния конформационных изменений полимерной цепи и размеров центральной сферической наночастицы на передачу энергии триплетов кристалла на полимерную оболочку. Характер изменения передачи энергии электронного возбуждения в зависимости от конформационных параметров (положения дельта-функциональная ямы r_0 и параметра q_0) представлены на рис. 4 и 5. Влияние размера сферической наночастицы представлено на рис. 6. Стоит отметить, что с точки зрения эксперимента и управления скоростью

переноса энергии в триплетной системе наиболее удобным параметром является константа $q_0 \sim T^{-1}$, т.к. можно легко обеспечить его изменение повышением или понижением температуры.

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

Список литературы

1. *Tao Jin; et al.* Shell Thickness and Heterogeneity Dependence of Triplet Energy Transfer between Core-Shell Quantum Dots and Adsorbed Molecules // *J. Am. Chem. Soc.* – 2025. – V. 147. – P. 16282-16292.

2. *Kucherenko M. G., Penkov S. A., Neyasov P. P.* Diffusion-controlled annihilation reactions in 2D and 3D nanostructures // *Materials Today: Proceedings*, 2022. - Vol. 71, Part 1: The 1st International Symposium on Emerging Materials and Devices / Ed. by N. Nuraje [et al.]. - P. 124-129.

3. *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.

4. *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.

5. *Penkov S.A.* Magnetic Field-Effect on Photoluminescence of Poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylenevinylene] (MEH-PPV) Nanoparticles in a Poly[vinyl butyral] Matrix // *Journal of Macromolecular Science - Physics (Part B).* - 2020. -V.59. -№5, - P. 1-10.

6. *Кучеренко М. Г., Пеньков С. А.* Магнитный эффект в аннигиляции триплетных экситонов сферического нанокристалла с адсорбированной полимерной цепью // *Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всерос. науч.-метод. конф., посвящ. 70-летию Оренбург. гос. ун-та, Оренбург, 30 янв. - 1 февр. 2025 г.: ОГУ, 2025.* - С. 3359-3367. - 9 с.

РОЛЬ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКА» В ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТОВ СПЕЦИАЛЬНОСТИ «ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

**Пискарёва Т.И., канд. техн. наук,
Анисина И.Н., канд. техн. наук**

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

Сегодня образование играет важную роль в жизни каждого человека. В современном мире существует множество учебных заведений, где можно получить качественное образование. На сегодняшний день важно не только получить формальное образование, но и развивать свои навыки и умения. Образование играет ключевую роль в формировании общества и определении будущего каждой страны. В современном мире, где технологии развиваются стремительными темпами, образование стало еще более важным для успешного развития индивидуума и общества в целом.

Как правило, студенты химико-биологического факультета (ХБФ) не сдают ЕГЭ по физике и, уже на первом курсе должны адаптироваться к таким дисциплинам, как «Физика», «Общий физический практикум» и т.д. Преподаватели данных дисциплин при изложении учебного материала должны повлиять на мотивацию обучающегося.

Наличие множества разработанных электронных курсов, методической литературы позволяет студентам ХБФ, наряду с учебными занятиями, самостоятельно изучать материал. Более эффективное усвоение материала предмета осуществляется на практических занятиях.

Связь физики и химии проявляется в разных аспектах. Это связано с общностью строения материи, в том числе молекул веществ, которые состоят из одних и тех же химических элементов, атомов и элементарных частиц. Также физика и химия включают общие методологические, фундаментальные научные идеи, законы и принципы (сохранения материи и энергии, периодичности, относительности и др.).

Дисциплина «Физика» включает в себя множество разделов. Но такие, как «Квантовая оптика», «Атомная физика» и «Излучение и спектры» являются основными для познания как физических, так и химических процессов и явлений. В основе данных разделов лежат представления об атомном строении вещества, закономерностях различного вида излучений. В связи с этим возникает необходимость взаимосвязи «Квантовой оптики», «Атомной физики» и раздела «Излучение и спектры» с процессами и явлениями в химии.

Важным звеном в организации такой межпредметной связи являются практические занятия. Прежде чем приступить к решению задач по квантовой оптике, необходимо напомнить студентам информацию о характеристиках и законах теплового излучения.

Таблица 1 – Примеры задач [1-5]

1. Имеется два абсолютно черных источника теплового излучения. Температура одного из них $T_1 = 2500$ К. Найти температуру другого источника, если длина волны, отвечающая максимуму его испускательной способности, на $\Delta\lambda = 0,50$ мкм больше длины волны, соответствующей максимуму испускательной способности первого источника.
2. Излучение Солнца по своему спектральному составу близко к излучению абсолютно черного тела, для которого максимум испускательной способности приходится на длину волны $0,48$ мкм. Найти массу, теряемую Солнцем каждую секунду за счет излучения. Оценить время, за которое масса Солнца уменьшится на 1%.
3. Определить поверхностную плотность I потока энергии излучения, падающего на зеркальную поверхность, если световое давление p при перпендикулярном падении лучей равно 10 мкПа.
4. Лазер излучил в импульсе длительностью $\tau = 0,13$ мс пучок света с энергией $E = 10$ Дж. Найти среднее давление такого светового импульса, если его сфокусировать в пятнышко диаметром $d = 10$ мкм на поверхность, перпендикулярную к пучку, с коэффициентом отражения $\rho = 0,50$.
5. Найти скорость фотоэлектронов, вырываемых электромагнитным излучением с длиной волны $\lambda = 18,0$ нм из ионов He^+ , которые находятся в основном состоянии и покоятся.

Изучение атомной структуры тесно связано с химией. При объяснении структуры атома и атомных орбиталей можно углубиться в химическую теорию периодической таблицы элементов. Понимание квантовых состояний частиц, таких как электроны, полезно для изучения химических связей и реакций. Также необходимым звеном при изучении квантовой и атомной физики студентами ХБФ является знание зависимости физических свойств вещества от атомного состава молекул. Это позволяет, используя формулу Бальмера и правило квантования, определить частоту излучения при различных переходах электрона в атоме любого химического элемента.

Таблица 2 – Примеры задач [5-7]

6. Определить первый потенциал U_1 возбуждения атома водорода.
7. Атом водорода в основном состоянии поглотил квант света с длиной волны $\lambda = 121,5$ нм. Определить радиус r электронной орбиты возбужденного атома водорода.
8. Вычислить частоты ν_1 и ν_2 вращения электрона в атоме водорода на второй и третьей орбитах. Сравнить эти частоты с частотой излучения при переходе электрона с третьей на вторую орбиту.
9. Вычислить длину волны λ , которую испускает ион гелия He^+ при переходе со второго энергетического уровня на первый.
10. Найти энергию связи электрона в основном состоянии водородоподобных ионов, в спектре которых длина волны третьей линии серии Бальмера равна $108,5$ нм.

Используя законы сохранения энергии и закон Мозли, можно рассчитать длины волн в различных сериях рентгеновского излучения, что позволяет студентам химико-биологического факультета исследовать спектры, возникающие в рентгеновских трубках.

Таблица 3 – Примеры задач [5-7]

11. Найти напряжение на рентгеновской трубке с никелевым антикатодом, если разность длин волн K_{α} -линии и коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра равна 84 пм.
12. Определить скорость v электронов, падающих на антикатод рентгеновской трубки, если минимальная длина волны λ_{\min} в сплошном спектре рентгеновского излучения равна 1 нм.
13. Вычислить наибольшую длину волны λ_{\max} в K-серии характеристического рентгеновского спектра скандия.
14. При исследовании линейчатого рентгеновского спектра некоторого элемента было найдено, что длина волны L линии K_{α} равна 76 пм. Какой это элемент?
15. Определить энергию E фотона, соответствующего линии K_{α} в характеристическом спектре марганца ($Z=25$).

Физика как учебный предмет естественнонаучного цикла является базой для изучения смежных и специальных дисциплин для студентов специальности «Фундаментальная и прикладная химия». Изучение разделов квантовой и атомной физики с решением задач профессиональной направленности на практических занятиях способствует освоению химиками фундаментальных основ части естествознания, а также подготовке к восприятию последующих общих и специальных курсов, предметом изучения которых являются общетеоретические вопросы, касающиеся строения и свойств молекул химических соединений, процессов превращения веществ, изучение условий протекания химических реакций и совершающихся при этом физических явлений.

Список литературы

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т 4. Оптика. М.: Физматлит, 2006.
2. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т 5. Атомная и ядерная физика. М.: Физматлит, 2006.
3. Савельев И.В. Сборник вопросов и задач по общей физике. М.: Наука. 1982.
4. Волькенштейн В.С. Сборник задач по общей физике. М.: Высшая школа. 2006.
5. Беликов Б.С. Решение задач по физике. М.: Высшая школа. 1986.
6. Чертов, А. Г. Задачник по физике : учеб. пособие для втузов / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев.- 5-е изд., перераб. и доп. - М. : Высш. шк., 1988. - 527 с.

7. Иродов, И.Е. Задачи по общей физике [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / И.Е. Иродов. – 10-е издание. (эл.). – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, – 2014. – 431 с.

ИНФОРМАТИЗАЦИЯ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА НА ПРИМЕРЕ МАССОВОГО ОТКРЫТОГО ОНЛАЙН – КУРСА «ФИЗИКА ДЛЯ ТЕХНИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ»

Цветкова Е.В., Якупов Г.С.

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

В последнее время актуализируется значимость использования информационных технологий и физического моделирования при изучении физики, т.к. процесс изучения физических законов нуждается в пересмотре и совершенствовании. Это особенно актуально в условиях информатизации образования, возрастающих требований в подготовке бакалавров и магистров, необходимости обновления учебно-методического обеспечения и повышения качества образования в современных условиях.

Быстрое развитие образовательных технологий – не просто одна из примет современности. Образование – как в России, так и за рубежом – в недалеком будущем ждут кардинальные изменения. Электронные технологии открывают возможности для качественного скачка в образовании, когда изменится и роль университетов, и функции преподавателей, и организация учебного процесса, обострится конкуренция между вузами. В этих условиях вузам важно четко понимать свои цели и задачи, выстраивать свою политику так, чтобы не уступить достигнутых позиций. В частности, это касается и политики вузов в отношении использования массовых открытых онлайн-курсов (англ. Massive Open Online Courses, MOOC).

В условиях вхождения общества в информационную эпоху, информационно-коммуникационные образовательные технологии постепенно охватывают всё образование. Происходит ускоренный рост потока информации и знаний, их глобализация. Требуются новые подходы к образовательной деятельности, культуре мышления, соответствующий уровень владения знаниями и компетенциями. Сфера образования соответственно изменяется в условиях происходящих перемен. Этот процесс сопровождается изменением целей образования, характером познаний и трансформаций роли и места образования в современном обществе.

Модернизация современного образования одним из своих приоритетов выделяет информатизацию, главной задачей которой является создание единой информационно-образовательной среды, как одного из условий достижения нового качества образования. Основная задача информатизации учебного процесса – адаптация образовательной среды к интересам и потребностям студентов в получении знаний по предмету, обеспечение сетевого взаимодействия между всеми субъектами образовательного процесса и применение информационно-коммуникационных технологий. Её отличительная черта – создание условий для выявления новых образовательных

технологий, новых методов и форм учебной работы, увеличения разнообразия, широты и интенсивности применения информационно-коммуникационных технологий [1]. Несомненным преимуществом внедрения информатизации, является организация дистанционного обучения. Дистанционное обучение – это совокупность информационных технологий, обеспечивающих предоставление обучаемым основного объема изучаемого материала, интерактивное взаимодействие обучаемых и преподавателей в процессе обучения, возможность самостоятельной работы студентов при изучении учебного материала.

Дистанционные технологии сегодня выгодно дополняют и расширяют традиционные формы организации образовательного процесса. Дистанционное обучение с помощью компьютера проводится без отрыва от работы и практически без выездов с места проживания обучаемых [2]. Для реализации дистанционного обучения в ОГУ используются массовые открытые онлайн - курсы (МООК) на электронной образовательной платформе Moodle, которая удовлетворяет учебным целям университета. Функциональные возможности использования электронного курса МООК в образовательном процессе в значительной степени определяется его дидактическими свойствами, такими как интерактивность, коммуникативность, возможность представления учебных материалов - текст, графика, анимация, аудио, видео, средствами мультимедиа, применением компьютерного моделирования для исследования образовательных объектов, а также автоматизация различных видов учебных работ. МООК – это не просто дистанционные курсы образования, это отдельная методика обучения, включающая в себя большой комплекс разнообразной деятельности.

Использование электронного курса МООК в образовательном процессе в сочетании с системами управления обучением и управления образовательным контентом позволяет эффективно реализовать:

- организацию самостоятельной когнитивной деятельности учащихся;
- организацию индивидуальной образовательной поддержки учебной деятельности каждого студента преподавателем;
- организацию групповой учебной деятельности с применением средств информационно-коммуникационных технологий [3].

Функциональная структура электронного курса и входящих в его состав функциональных элементов соответствуют их назначению в образовательном процессе и уровню образования изучаемой дисциплины.

Технические требования к электронному курсу МООК регламентируются оптимальной эксплуатацией. В курсе представлены видео-лекции по всем разделам изучения дисциплины «Физика», видео-разбор задач из каждого раздела, а также теоретический материал с проверочными вопросами по темам. Организация диалогового взаимодействия студент - преподаватель включает тест по каждому разделу физики и рекомендации по недостаточно усвоенным и изученным разделам, поиск необходимой информации, выбор маршрута обучения по объему и уровню сложности. Тесты МООК – отличный ресурс для

каждого преподавателя. Можно создавать различные типы вопросов, случайным образом генерировать тесты из банка вопросов, давать несколько попыток прохождения теста. Обратная связь с преподавателем представлена в виде элементов «Опрос для обучающихся» и «Выходное анкетирование».

Эргономические требования курса учитывают комплекс физиологических, психофизиологических и психологических особенностей студента, проявляющиеся в процессе использования электронного курса, обусловлены созданием дружественного интерфейса, обеспечением оптимального управления, включая развитую систему навигации и достаточную скорость извлечения информации. Рассматривая интерфейс как физическое динамическое устройство, взаимодействующее со студентом, с учетом эргономических требований выбраны размеры и тип шрифта, цветовое оформление, навигация по разделам [4].

МООК: «Физика для технических специальностей» [5], предназначен для обучающихся по программам высшего образования по направлениям подготовки, входящим в образовательные области «Математические и естественные науки» и «Инженерное дело, технологии и технические науки». Представленный курс будет полезен для студентов, обучающихся дистанционно при изучении учебной дисциплины «Физика».

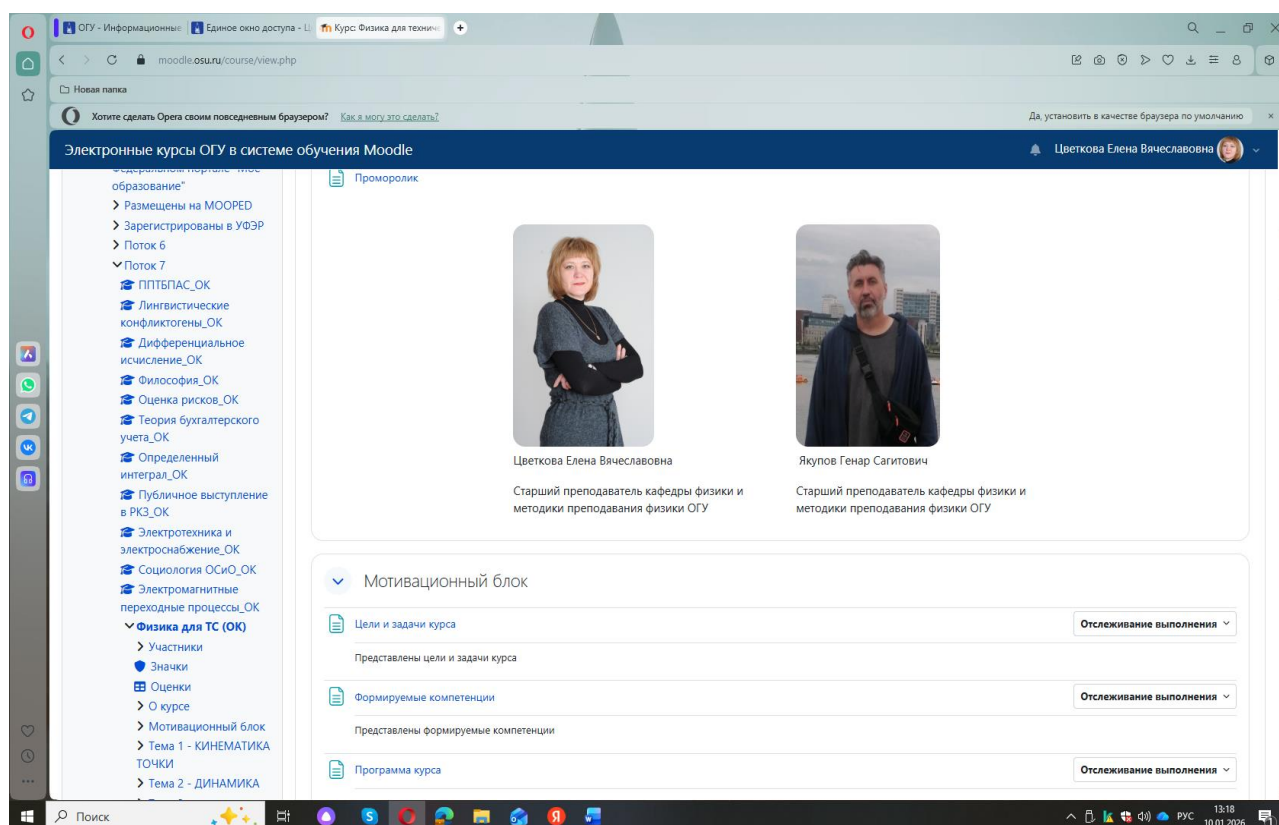


Рисунок 1 - Скриншот страницы курса МООК «Физика для технических специальностей»

Электронный курс прошёл апробацию в учебном процессе ОГУ. На курс подписана группа студентов 3-24ЭТМК(б) заочного отделения транспортного факультета. В курсе сформирован журнал учебных достижений студентов, пройдены тесты и установлена обратная связь с преподавателем.

Сейчас трудно представить себе современный университет, у которого не было бы своих MOOK, — массовые открытые онлайн-курсы стали для вузов во всём мире визитной карточкой: имиджевым продуктом и одновременно способом привлечь абитуриентов на более серьёзные образовательные программы - магистратуру, дополнительное профессиональное образование. Механизм простой: человек посмотрел курс - увлёкся темой, остался доволен тем, как её преподносят конкретные преподаватели университета и решил туда поступать для более глубокого изучения темы.

Благодаря MOOK стираются барьеры: человек может жить в маленьком провинциальном городе, но осваивать отдельные дисциплины по курсам преподавателей, которые считаются ведущими экспертами по этим темам в стране или даже в мире.

Список литературы

1. Пеккер, П.Л. Востребованность онлайн курсов в России / П. Л. Пеккер // Современные информационные технологии и ИТ-образование. — 2016. — Том 12. — № 4. — С. 73 -78.

2. Неборский, Е.В. Образование будущего: ключевые педагогические инновации и тенденции в развитии образовательной среды / Е. В. Неборский // Интернет-журнал Науковедение. — 2015. — Том 7. — № 2. — С. 149-159.

3. Титова, С.В. MOOK в российском образовании / С.В. Титова // Высшее образование в России. — 2015. — № 12. — С. 145-151.

4. Цветкова Е. В. Использование электронной образовательной платформы MOODLE при дистанционном изучении учебной дисциплины «Физика» студентами ОГУ / Е.В. Цветкова // Матер. всеросс. научно-метод. конфер. «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры». Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ОГУ. – 2022. – С. 2925–2938. – ISBN 978-5-7410-2712-7.

5. Массовый открытый онлайн-курс (MOOK): «Физика для технических специальностей». Режим доступа: <https://moodle.osu.ru/course/view.php?id=25712>

ОБ ИЗМЕНЕНИИ СТРУКТУРНОГО СОВЕРШЕНСТВА КРЕМНЕЗЁМА ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ СВЧ-ПОЛЯ

Четверикова А.Г., д-р физ.-мат. наук, доцент

Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Кремний и кислород – два самых распространённых элемента в земной коре, в свою очередь диоксид кремния составляет около 95 % земной коры [1]. Природный SiO_2 находит применение в качестве сырья широкого спектра продуктов и изделий: стекла, керамики, абразивов, резин, огнеупоров, бетонных изделий и др. [2-4]. Основными операциями в процессе переработки такого сырья являются термическая обработка, растворение или перевод в расплав, воздействие СВЧ-поля [5, 6]. Свободный SiO_2 обладает полиморфизмом, на сегодня известно более 10 полиморфных модификаций. Три из них относят к низкотемпературным модификациям, структурные параметры которых приведены в таблице 1 [7].

Таблица 1 – Структурные данные низкотемпературных полиморфных модификаций кремнезёма

Сингония	Параметры элементарной ячейки	Полиморфная модификация SiO_2
Тригональная	$a=b \neq c \quad \alpha=\beta=90^\circ \quad \gamma=120^\circ$	α -кварц
Тетрагональная	$a=b \neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	α -кристобалит
Ромбическая	$a \neq b \neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	α -тридимит

Целью исследования являлось изучение влияния СВЧ-поля на тонкую структуру высокочистого порошка диоксида кремния, частицы которого после ситового отсева имели размеры менее 40 мкм. Исходные частицы подвергали воздействию СВЧ-поля частотой 2,45 ГГц при мощности 600 Вт в течение 10 минут в воздушной среде. Для исследования низкотемпературных полиморфных модификаций кремнезёма удобно использовать метод рентгеновской дифракции, который позволяет оценивать степень структурного совершенства диоксида кремния.

Методика получения рентгеновских спектров подробно описана в монографии [8]. Основным методом исследования являлась рентгенография, с её помощью определяли фазовые составы порошка до и после облучения в СВЧ-поле, размеры областей когерентного рассеяния (ОКР), являющиеся по сути эффективными размерами кристаллитов, и индексы кристалличности (ИК) как показатели упорядоченности кристаллов.

Результаты рентгенофазового анализа приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Фазовые составы порошков диоксида кремния

Фаза	Доля фазы в системе (об. %)	
	Исходное состояние	После воздействия СВЧ-поля
α-кварц	45	55
α-кристобалит	45	42
α-тридимит	10	3

Структурное состояние кремнезёма можно разделить на три типа: кристаллическое (структурно совершенное), квазикристаллическое (разная степень структурного разупорядочения) и наноразмерное (тонкодисперсное, скрытокристаллическое). Наиболее совершенным в структурном плане является тригональный α -SiO₂ (кварц) с пространственной группой P 3₁21. В силу высокого совершенства структуры, он является устойчивой кристаллической фазой; реагирует только с плавиковой и фосфорной кислотами, что делает его химически инертным.

Важной характеристикой структурного состояния кварца является индекс кристалличности (ИК_{SiO₂}). Он указывает на присутствие возможных дефектов, искажающих структуру и весьма информативен для прогноза качества высокотехнологичных изделий из кварцевого сырья

Рентгенографический метод определения ИК_{SiO₂} менее распространён, чем Фурье-спектроскопия, но также применяется, особенно если кварц – одна из основных фаз [9, 10]. Для рентгенографических исследований структурно-разупорядоченного кремнезёма наибольший интерес представляет относительно небольшая угловая область 2θ от 18 до 25° на Cu-излучении. Именно здесь сосредоточена основная информация, позволяющая воспроизвести структуру – вид дифракционного профиля, его полуширина, угловое положение.

Обычно используют самый интенсивный рефлекс кварца (101) в районе $\sim 26.6^\circ 2\theta$ (Cu_{K α}), а затем измеряют ширину рефлекса на полувысоте (FWHM) (чем уже пик, тем выше кристалличность). Для количественной оценки FWHM используют уравнение Шеррера для оценки размера кристаллитов:

$$D = K\lambda / (\beta \cos\theta),$$

где D – размер кристаллита, λ – длина волны излучения, β – уширение рефлекса в радианах, K – постоянная (~ 0.9).

Иногда индекс кристалличности кварца рассчитывается из рентгенографических данных по соотношению рефлексов мультиплета в интервале углов дифракции $2\theta = 66 \div 70^\circ$ [11].

В зависимости от способов получения низкотемпературные модификации диоксида кремния могут изменяться от хорошо окристаллизованных, до плохо квазикристаллических (рентгеноаморфных).

Тонкодисперсное состояние полностью разупорядоченных представителей кремнезёма позволяет относить их к нанобъектам. Например, рентгенограммы аморфного SiO₂·nH₂O (опал, силикагель) характеризуются наличием широкого размытого гало на дифрактограмме с максимумом от 0.38

до 0.42 нм и асимметрией [7, 12].

$ИК_{SiO_2}$ – это непрерывная шкала, отражающая постепенное улучшение кристаллического порядка. Он напрямую связан с размером кристаллических доменов (областей когерентного рассеяния ОКР) и количеством дефектов в решётке (рис. 1).



Рисунок

1 – Схема взаимосвязи индекса кристалличности кварца $ИК_{SiO_2}$ с рентгенограммой

Интерпретация значений $ИК_{SiO_2}$ (табл. 3) :

– высокое (0,9÷1,0) соответствует хорошо окристаллизованному кварцу с упорядоченной решёткой, крупными кристаллитами. Характерно для метаморфических (кварциты), магматических (граниты) и осадочных (некоторые кварцевые песчаники) пород высокотемпературного происхождения или прошедших глубокий диагенез;

– низкое (0,2÷0,5) указывает на низкотемпературный, скрытокристаллический кварц (халцедон, кремь, опал) с разупорядоченной структурой, малым размером кристаллитов и большим количеством дефектов. Характерен для осадочных (кремни, диатомиты) и гидротермальных образований.

– промежуточное (0,5÷0,8) свойственно различным стадиям диагенеза (превращение опала в халцедон и кварц) или слабометаморфизованным породам.

Таблица 3 – Интерпретация значений индекса кристалличности $ИК_{SiO_2}$

Значение $ИК_{Si}$	< 0,3	0,3 ÷ 0,6	0,6 ÷ 0,8	> 0,8
Размер кристаллитов	Крайне малые (<50 нм),	Микро- и нанокристаллические агрегаты	Кристаллит размером	Крупные (десятки-сотни мкм),

паракристаллическая структура, высокий беспорядок	(волокна, усы, сферолиты)	в несколько мкм	идиоморфные кристаллы с упорядоченной решеткой
---	---------------------------	-----------------	--

В процессе обработки в СВЧ-поле в исследуемом химически чистом кремнезёме увеличилось количество α -кварца за счёт фазовых превращений : уменьшения количества α -кристобалита и, особенно, α -тридимита. Общее содержание кристаллических фаз составило 0,75% от исходного. Во всех случаях уменьшились размеры ОКР [13] и значения $ИК_{SiO_2}$ (табл. 4).

Таблица 4 – Изменения структурного совершенства кремнезёма в результате воздействия СВЧ-поля

Фаза	Исходное состояние		После СВЧ-поля		$ОКР_{СВЧ} / ОКР_0$	$ИК_{СВЧ} / ИК_0$
	$ОКР_0$, нм	$ИК_0$, отн.ед.	$ОКР_{СВЧ}$, нм	$ИК_{СВЧ}$, отн.ед.		
α-кварц	53	0,7	30	0.41	0.57	0.58
α-кристобалит	47	0,7	28	0,39	0.6	0.57
α- тридимит	50	0,3	26	0.17	0.52	0.56

По результатам, приведённым в таблице 4, можно связать изменения в фазовом составе конкретно с уменьшением степени кристалличности частиц, что отражается в существенном уменьшении самих кристаллитов (ОКР). Это подтверждается уменьшением объемной доли кристаллических модификаций.

Описанный процесс может иметь отложенный эффект, проявляющийся при технологических воздействиях.

Проведённое исследование показывает, что изучение рентгенографических параметров кристаллических структур ($ОКР$ и $ИК_{SiO_2}$) позволяет получить важную научную информацию об их структурных преобразованиях.

Список литературы

1. Гриценко В. А. Структура границ раздела кремний/оксид и нитрид/оксид //Успехи физических наук. – 2009. – Т. 179. – №. 9. – С. 921-930.
2. Зеленков В. Н., Потапов в. В. Биологическая активность соединений кремния. Часть 2. Аморфные наноразмерные кремнеземы: химикотехнологические аспекты получения, применения и перспективы использования гидротермальных источников (обзор литературы) // Вестник РАЕН. – 2018. – т. 18. – №. 1. – с. 41-50.
3. Семенова С. Н., Чайкун А. М. Силиконовые резиновые композиции с повышенной термостойкостью (обзор) //Труды ВИАМ. – 2020. – №. 11 (93). – С. 31-37

4. Копаница Н. О., Саркисов Ю. С., Демьяненко О. В. Применение нанодисперсного кремнезема в производстве строительных смесей // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. – 2016. – №. 5 (58). – С. 140-150.

5. Каныгина, О. Н. Структурные трансформации в оксидах алюминия и кремния в микроволновых полях / О. Н. Каныгина, М. М. Филяк, А. Г. Четверикова // Материаловедение. – 2020. – № 5. – С. 37-42. – DOI 10.31044/1684-579X-2020-0-5-37-42. – EDN INNESD.

6. Патент № 2363655 С2 Российская Федерация, МПК С01В 33/143. Золи на основе кремнезема, их получение и применение : № 2006139051/15 : заявл. 05.04.2005 : опубл. 10.08.2009 / Г. Мэнкин, М. Токарз, Ф. Ханссон ; заявитель АКЦО НОБЕЛЬ Н.В.. – EDN HNUXSK.

7. Ильичёва О. М., Наумкина Н. И., Лыгина Т. З. О структурном совершенстве природного и синтетического кремнезема // Вестник Казанского технологического университета. – 2010. – №. 8. – С. 459-464.

8. Четверикова, А. Г. Структурные трансформации в оксидах, составляющих природные глины, под воздействием СВЧ-поля / А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина, М. М. Филяк ; Оренбургский государственный университет. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2021. – 208 с. – ISBN 978-5-7410-2621-2. – EDN NNEIJL.

9. Лютоев В. П., Лысюк А. Ю. Структура и текстура кремнезема импактитов Карской астроблемы // Вестник геонаук. 2015. №9 (249). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/struktura-i-tekstura-kremnezema-impaktitov-karskoy-astroblemy> (дата обращения: 06.01.2026).

10. Коровкин М. В. и др. Оценка степени кристалличности кварцевого сырья // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2023. – Т. 334. – №. 8. – С. 59-67.

11. Liu G. et al. Crystallinity and formation of silica in Palaeozoic shales: A new quantification calculation method based on X-Ray diffraction // Marine and Petroleum Geology. – 2023. – Т. 150. – С. 106124. <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2023.106124>

12. Шкловер В. Я. и др. Исследование морфологии и кристаллической структуры природных кремнеземов методами электронной микроскопии и электронографии // Кристаллография. – 2021. – Т. 66. – №. 4. – С. 626-635.

13. Четверикова, А. Г. Изменения объемов областей когерентного рассеяния в кристаллах оксидов под воздействием сверхвысокочастотного излучения / А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина // Химическая физика молекул и полифункциональных материалов : Сборник материалов международной научной конференции, Оренбург, 28–30 ноября 2024 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2024. – С. 169-173. – EDN TZUABE.

ДЕЗАКТИВАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАНТОВОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ ВБЛИЗИ ПЛАЗМОННОЙ ПОЛУСФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Шихавцов М.А.
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Интерес исследователей к оптическим свойствам плазмонных полусферических наночастиц (НЧ) преимущественно связан с использованием островковых металлических пленок в поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии и биосенсорике [1, 2]. В работе [3] сообщается, что введение серебряных островковых пленок в биосенсоры на основе ряда ферментов повышает ферментативную активность и, как следствие, выявляемость анализируемых веществ. Конструкция микросенсорной системы для биосенсоров с использованием плазмонного островка предложена в [4]. По мнению авторов работы [5] структурированное оптическое волокно с гетерогенной сердцевиной и нанесенной на него золотой островковой пленкой может служить сенсорным зондом.

Экспериментальные исследования показывают, что максимум спектра поглощения поверхностной островковой пленки сдвинут в сторону больших длин волн относительно положения плазмонного резонанса в сферических НЧ [6, 7]. Это связано с тем, что островки имеют полусферическую форму. Теоретический анализ поляризуемости полусферической НЧ в однородном электрическом поле выполнен в работах [8, 9] для изолированной НЧ и в [7, 10] для оболочечной НЧ на диэлектрической подложке. В указанных теоретических работах использовалось квазистатическое приближение. В этом случае потенциал электрического поля, создаваемого поляризованной полусферой, является решением уравнения Лапласа и записывается в виде разложения в ряд. Коэффициенты ряда являются корнями системы линейных алгебраических уравнений, которая содержит $2N$ уравнений с $2N$ неизвестными (N – число членов в разложении потенциала). Система получается из граничных условий, требующих равенства потенциалов и нормальных составляющих векторов электрической индукции на всех границах раздела сред. В результате выполненного авторами теоретического исследования найдены области частот, где решение системы стабильно или может быть стабилизировано путем увеличения числа уравнений, а также показано, что чем больше мнимая часть диэлектрической проницаемости металла, тем стабильнее решение.

В данной работе на основе метода, предложенного в [8], исследованы спектры мультипольных поляризуемостей полусферической НЧ в поле электрического диполя, расположенного вблизи вершины полусферы, как показано на рисунке 1. В рамках подхода, используемого в работах [11, 12], рассчитаны скорости радиационной и нерadiационной дезактивации

квантового излучателя (атома, молекулы или квантовой точки), размещенного вблизи НЧ.

Потенциал внешнего электрического поля, создаваемого диполем, складывается из потенциалов полей φ_+ положительного и φ_- отрицательного зарядов. В сферической системе координат потенциал поля точечного заряда q , расположенного в точке с координатами (a, θ_0, α_0) , при $r < a$ записывается в виде

$$\varphi(r, \theta, \alpha) = \frac{q}{\varepsilon_1} \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r^l}{a^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta_0, \alpha_0) Y_{lm}(\theta, \alpha)$$

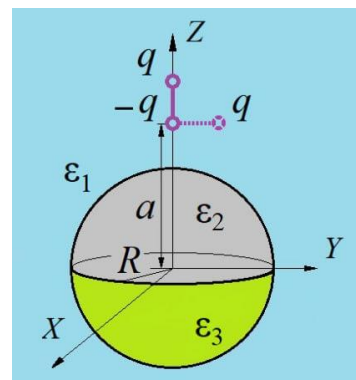


Рисунок 1 – Электрический диполь вблизи вершины полусферы

где $Y_{lm}(\theta, \alpha)$ – сферическая функция, ε_1 – диэлектрическая проницаемость среды.

Когда диполь находится на оси z и ориентирован вдоль нее (рисунок 1), потенциал поля положительного заряда, расположенного на расстоянии $a + \Delta a$, раскладывается в ряд по степеням Δa . Если ограничиться двумя первыми членами ряда, то потенциал поля диполя будет иметь вид

$$\varphi(r, \theta) = -\frac{d}{\varepsilon_1} \sum_l \frac{(l+1)r^l}{a^{l+2}} P_l(\cos\theta), \quad r < a,$$

где $P_l(\cos\theta)$ – полином Лежандра, $d = q\Delta a$ – дипольный момент.

Если диполь ориентирован вдоль оси x , при этом отрицательный заряд расположен на расстоянии a от начала координат на оси z , а положительный заряд имеет координаты $(a + \Delta a, \theta_0, 0)$, то разложение потенциала поля положительного заряда в ряд Тейлора в окрестности точки, в которой находится отрицательный заряд, приводит к следующему виду потенциала поля диполя

$$\varphi(r, \theta, \alpha) = -\frac{d}{\varepsilon_1} \sum_l \frac{r^l}{a^{l+2}} P_l^1(\cos\theta) \cos\alpha,$$

где $P_l^1(\cos\theta)$ – присоединенный полином Лежандра, $d = qa\theta_0$ – дипольный момент.

Поскольку полусферическая частица является частным случаем частицы, состоящей из двух одинаковых полушарий с разной диэлектрической проницаемостью, все пространство делится на три области с разными электродинамическими характеристиками [8] (рисунок 1). Для радиально ориентированного диполя потенциал поля внутри и вне составной частицы записывается в виде ряда по полиномам Лежандра, для касательно ориентированного диполя – в виде ряда по присоединенным полиномам Лежандра.

Радиальная ориентация диполя

Потенциал поля, создаваемого диполем и поляризованной НЧ, имеет вид

$$\varphi_1(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{D_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta) - \frac{d}{\varepsilon_1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(l+1)r^l}{a^{l+2}} P_l(\cos \theta), \quad R < r < a, \quad (1)$$

$$\varphi_2(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta), \quad r < R, \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2, \quad (2)$$

$$\varphi_3(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l r^l P_l(\cos \theta), \quad r < R, \quad \pi/2 \leq \theta \leq \pi, \quad (3)$$

где R – радиус НЧ.

Коэффициенты A_l , B_l , D_l находятся из условий непрерывности потенциала и нормальной составляющей вектора электрической индукции на границах раздела сред. На плоской границе между полусферами, т. е. при $\theta = \pi/2$, граничные условия имеют вид

$$\varphi_2(r, \pi/2) = \varphi_3(r, \pi/2), \quad \varepsilon_2 \frac{\partial \varphi_2(r, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\pi/2} = \varepsilon_3 \frac{\partial \varphi_3(r, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\pi/2}. \quad (4)$$

На поверхности НЧ, т. е. при $r = R$, граничные условия следующие:

$$\varphi_1(R, \theta) = \varphi_2(R, \theta), \quad \varepsilon_1 \frac{\partial \varphi_1(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r=R} = \varepsilon_2 \frac{\partial \varphi_2(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2, \quad (5.1)$$

$$\varphi_1(R, \theta) = \varphi_3(R, \theta), \quad \varepsilon_1 \frac{\partial \varphi_1(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r=R} = \varepsilon_3 \frac{\partial \varphi_3(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad \pi/2 \leq \theta \leq \pi. \quad (5.2)$$

Подстановка потенциалов (2) и (3) в граничное условие (4) приводит к связи между коэффициентами A_l и B_l [8]

$$A_l = \eta_l B_l, \quad \eta_l = \begin{cases} 1, & l - \text{четное}, \\ \varepsilon_3/\varepsilon_2, & l - \text{нечетное} \end{cases} \quad (6)$$

Подставим потенциалы (1) – (3) в условия (5.1) и (5.2). Умножим каждое из полученных равенств на $P_k(\cos \theta) \sin \theta$ и проинтегрируем по θ от 0 до $\pi/2$ для верхнего полупространства и от $\pi/2$ до π для нижнего полупространства. Учитывая (6), получим систему уравнений для неизвестных коэффициентов B_l и D_l

$$\begin{cases} \sum_l (a_{kl} B_l + b_{kl} D_l) = \sum_l f_{kl}, \\ \sum_l (c_{kl} B_l + d_{kl} D_l) = \sum_l g_{kl}. \end{cases} \quad (7)$$

Коэффициенты в системе (7) задаются следующими выражениями

$$\begin{aligned} a_{kl} &= -R^l U_{kl} (\eta_l + (-1)^{l+k}), & b_{kl} &= \frac{U_{kl}}{R^{l+1}} (1 + (-1)^{l+k}), \\ c_{kl} &= l R^l U_{kl} (\varepsilon_2 \eta_l + \varepsilon_3 (-1)^{l+k}), & d_{kl} &= \frac{\varepsilon_1 (l+1) U_{kl}}{R^{l+1}} (1 + (-1)^{l+k}), \end{aligned}$$

$$f_{kl} = \frac{d(l+1)R^l}{\varepsilon_1 a^{l+2}} U_{kl} \left(1 + (-1)^{l+k}\right), \quad g_{kl} = -\frac{dl(l+1)R^l}{a^{l+2}} U_{kl} \left(1 + (-1)^{l+k}\right),$$

$$\text{где } U_{kl} = \int_0^{\pi/2} P_k(\cos\theta) P_l(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta.$$

Касательная ориентация диполя

В этом случае потенциал поля, создаваемого диполем и поляризованной НЧ, записывается в виде

$$\varphi_1(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{D_l}{r^{l+1}} P_l^1(\cos\theta) \cos\alpha - \frac{d}{\varepsilon_1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r^l}{a^{l+2}} P_l^1(\cos\theta) \cos\alpha, \quad R < r < a \quad (8)$$

$$\varphi_2(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l^1(\cos\theta) \cos\alpha, \quad r < R, \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2, \quad (9)$$

$$\varphi_3(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l r^l P_l^1(\cos\theta) \cos\alpha, \quad r < R, \quad \pi/2 \leq \theta \leq \pi, \quad (10)$$

где R – радиус НЧ.

Из граничных условий (4) для коэффициента η_l получается

$$\eta_l = \begin{cases} \varepsilon_3/\varepsilon_2, & l - \text{четное}, \\ 1, & l - \text{нечетное} \end{cases}$$

Подстановка (8) – (10) в граничные условия (5) также приводит к системе уравнений (7), коэффициенты в которой теперь задаются выражениями

$$a_{kl} = -R^l U_{kl}^1 \left(\eta_l + (-1)^{l+k}\right), \quad b_{kl} = \frac{U_{kl}^1}{R^{l+1}} \left(1 + (-1)^{l+k}\right),$$

$$c_{kl} = lR^l U_{kl}^1 \left(\varepsilon_2 \eta_l + \varepsilon_3 (-1)^{l+k}\right), \quad d_{kl} = \frac{\varepsilon_1 (l+1) U_{kl}^1}{R^{l+1}} \left(1 + (-1)^{l+k}\right),$$

$$f_{kl} = \frac{dR^l}{\varepsilon_1 a^{l+2}} U_{kl}^1 \left(1 + (-1)^{l+k}\right), \quad g_{kl} = -\frac{dlR^l}{a^{l+2}} U_{kl}^1 \left(1 + (-1)^{l+k}\right),$$

$$\text{где } U_{kl}^1 = \int_0^{\pi/2} P_k^1(\cos\theta) P_l^1(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta.$$

Скорость распада возбуждения квантового излучателя вблизи наночастицы

Относительная полная скорость распада возбужденного состояния квантового излучателя в присутствии НЧ согласно [11, 12] определяется выражением

$$\frac{\gamma_{tot}}{\gamma_0} = 1 + \frac{3c^3}{2\omega^3 \sqrt{\varepsilon_1}} \text{Im} \frac{d\mathbf{E}(a)}{d^2}, \quad (11)$$

где $\mathbf{E}(a)$ – напряженность поля, создаваемого поляризованной НЧ в месте расположения диполя, γ_0 – скорость распада в отсутствие НЧ.

Для радиально ориентированного диполя использование формулы (11) и слагаемого, содержащего коэффициент D_l в формуле (1) и задающего потенциал поля поляризованной НЧ, приводит к следующему выражению для относительной скорости дезактивации квантового излучателя

$$\left(\frac{\gamma_{tot}}{\gamma_0}\right)_{rad} = 1 + \frac{3c^3}{2\omega^3 \sqrt{\epsilon_1}} \operatorname{Im} \sum_l \frac{(l+1)D_l^{rad}}{a^{l+2}}. \quad (12)$$

Для касательно ориентированного диполя относительная скорость дезактивации имеет вид

$$\left(\frac{\gamma_{tot}}{\gamma_0}\right)_{tan} = 1 + \frac{3c^3}{4\omega^3 \sqrt{\epsilon_1}} \operatorname{Im} \sum_l \frac{l(l+1)D_l^{tan}}{a^{l+2}}. \quad (13)$$

Слагаемые в (12) и (13), содержащие мнимую часть суммы, определяют нерадиационные скорости распада возбуждения квантового излучателя.

Поскольку слагаемые с D_l в формулах (1) и (8) определяют потенциал поля наведенного в НЧ диполя, то относительная радиационная скорость распада возбуждения в присутствии НЧ может быть описана выражениями

$$\left(\frac{\gamma_r}{\gamma_0}\right)_{rad} = \left|1 + \epsilon_1 \frac{D_1^{rad}}{d}\right|^2, \quad \left(\frac{\gamma_r}{\gamma_0}\right)_{tan} = \left|1 - \epsilon_1 \frac{D_1^{tan}}{d}\right|^2. \quad (14)$$

Результаты расчетов

Расчеты по представленной модели были проведены для полусферических золотой и серебряной НЧ с радиусом $R = 20$ нм. Квантовый излучатель располагался на расстоянии $a = 30$ нм от центра НЧ. В расчетах использовалась диэлектрическая функция металла в обобщенной модели Друде $\epsilon_2(\omega) = \epsilon_\infty - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega/\tau)$. Параметры Друде на оптических частотах брались из монографии [12]: энергия объемного плазмона $\hbar\omega_p = 9,0$ эВ для золота и серебра, высокочастотная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_\infty = 3,7$ (Ag) и $\epsilon_\infty = 9,8$ (Au), время релаксации электронного газа $\tau = 40$ фс (Ag) и $\tau = 10$ фс (Au). Диэлектрическая постоянная окружающей НЧ среды выбирались равной $\epsilon_1 = 2$. Диэлектрическая постоянная ϵ_3 нижней полусферы совпадала с ϵ_1 .

На рисунке 2а изображены мнимые части коэффициента D_1^{rad} , определяющего дипольную поляризуемость серебряной полусферической НЧ, при радиальной ориентации диполя-источника. Как видно из рисунка, у полусферической НЧ появляются дополнительные плазмонные резонансы, однако их положение приходится на область нестабильности численного решения системы уравнений (7). Эта область, как указывается в [9], соответствует небольшим отрицательным значениям действительной части диэлектрической проницаемости металла. А именно, $\epsilon_2 \approx -5,6$ при $\omega \approx 4,4 \text{ фс}^{-1}$ и $\epsilon_2 \approx -0,7$ при $\omega \approx 6,5 \text{ фс}^{-1}$. Увеличение числа членов до $N = 400$ в разложении

потенциала (1) – (3) не стабилизирует решение: изменение числа членов на единицу меняет величину и положение максимумов. Поэтому расчеты для этой спектральной области некорректны.

На рисунке 2б приведены аналогичные зависимости для касательной ориентации диполя-источника. В этом случае также наблюдается нестабильность решения в диапазоне частот 4,4 – 6,5 фс^{-1} . Однако в области максимума при $\omega \approx 4,0 \text{фс}^{-1}$ решение стабильно.

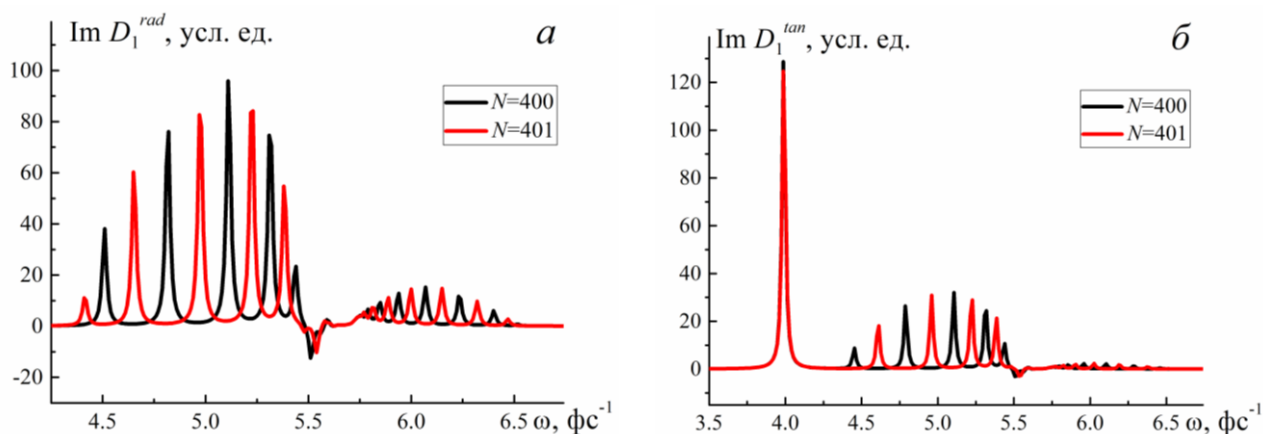


Рисунок 2 – Частотные зависимости мнимых частей коэффициентов D_1^{rad} (а) и D_1^{tan} (б) для полусферической серебряной НЧ при разном числе членов N в разложении потенциала

На рисунке 3 представлены частотные зависимости мнимых частей коэффициентов D_1^{rad} и D_1^{tan} при расположении диполя-источника вблизи золотой полусферической НЧ. Как видно из сравнения рисунков 2 и 3, область нестабильности у полусферической золотой НЧ более узкая, чем у серебряной НЧ, и составляет 3,4 – 3,8 фс^{-1} . Таким образом, уменьшение времени жизни плазмона приводит к лучшей сходимости решения, что согласуется с результатами работы [7].

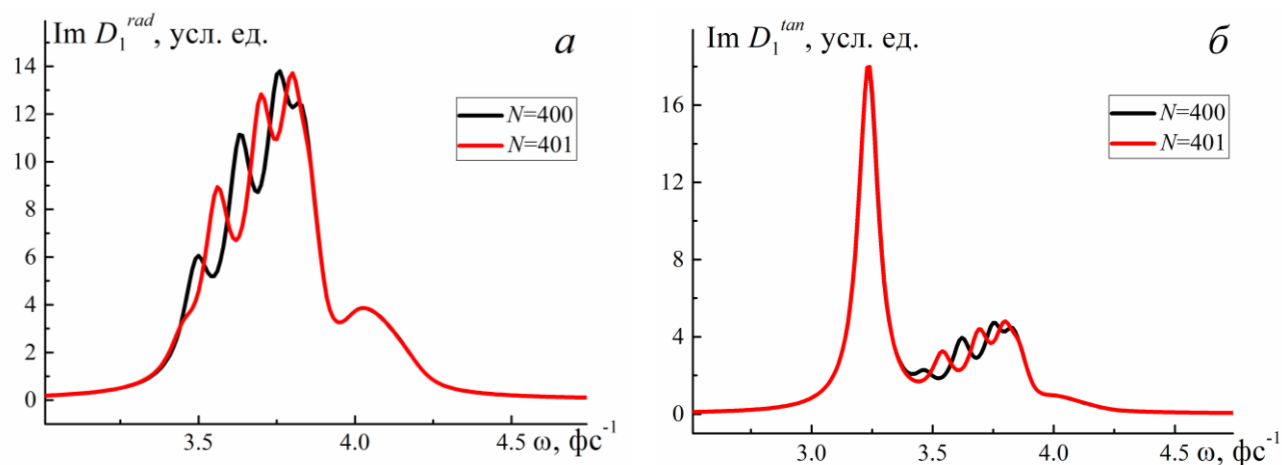


Рисунок 3 – Частотные зависимости мнимых частей коэффициентов D_1^{rad} (а) и D_1^{tan} (б) для полусферической золотой НЧ при разном числе членов N в разложении потенциала

На рисунке 4 приведены частотные зависимости относительных радиационных скоростей распада возбуждения, рассчитанные для касательной ориентации дипольного момента перехода при $N = 400$. Кривая 1 относится к полусферической НЧ, кривая 2 – к сплошной НЧ. Из рисунка видно, что максимум скорости излучения квантового излучателя вблизи полусферической НЧ сдвинут в область меньших частот по сравнению с положением максимума скорости излучения вблизи сплошной частицы, который приходится на частоту $\omega \approx 4,9 \text{ фс}^{-1}$ (Ag) и $\omega \approx 3,7 \text{ фс}^{-1}$ (Au). Также значение излучательной скорости в максимуме для полусферической НЧ меньше, чем для сплошной НЧ.

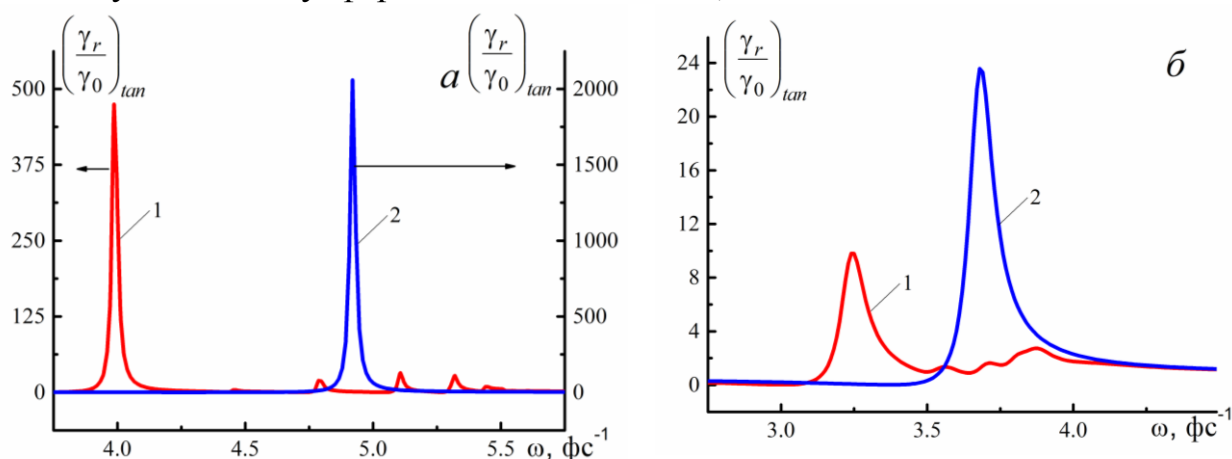


Рисунок 4 – Частотные зависимости относительных радиационных скоростей $(\gamma_r/\gamma_0)_{tan}$ распада возбуждения вблизи полусферической серебряной (а) и золотой (б) НЧ

На рисунке 5 приведены частотные зависимости относительных безызлучательных скоростей распада возбуждения, также рассчитанные для касательной ориентации дипольного момента перехода. Как следует из рисунка, для сплошной НЧ кроме максимума, соответствующего дипольным плазмонным колебаниям, появляются максимумы, соответствующие колебаниям высших мультипольностей. Для полусферической частицы картина аналогичная, однако максимумы высших мультипольностей приходятся на область неустойчивости решения системы (7).

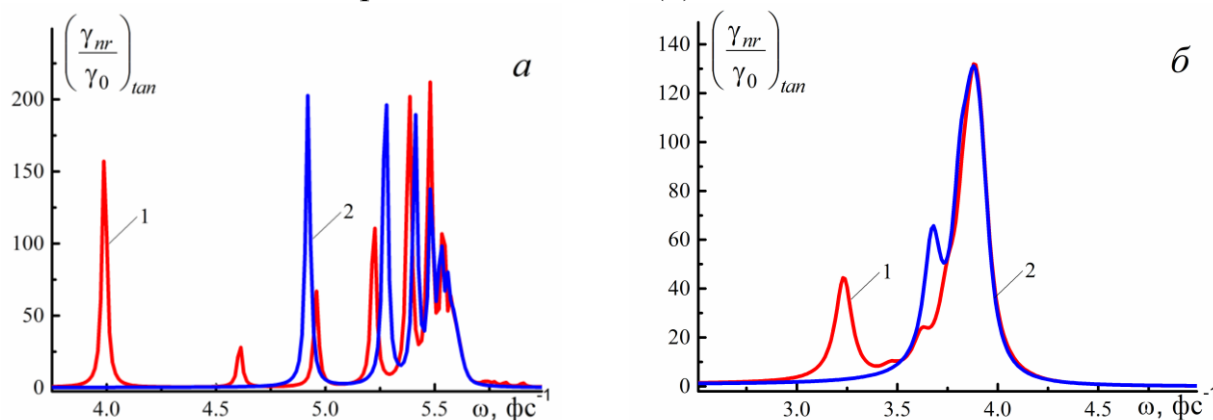


Рисунок 5 – Частотные зависимости относительных безызлучательных скоростей $(\gamma_{nr}/\gamma_0)_{tan}$ распада возбуждения вблизи полусферической серебряной (а) и золотой (б) НЧ. Обозначение кривых, как на рисунке 4

Таким образом, в данной работе теоретически исследовано влияние полусферической плазмонной НЧ на излучательные и безызлучательные переходы в квантовом излучателе, размещенном вблизи ее вершины, и выполнено сравнение со случаем сферической НЧ. Определен частотный диапазон, в котором решение стабильно, и полученные результаты могут быть использованы в анализе экспериментальных данных по влиянию островковых пленок на люминесценцию квантовых излучателей.

Список литературы

1. *Серебренникова, С.И.* Формирование островковых SERS-пленок на поверхности трековых мембран и кремниевых подложек / С.И. Серебренникова, В.И. Кукушкин, О.В. Криставчук, Е.Н. Морозова, А.С. Астраханцева, А.Н. Нечаев // Известия РАН. Серия физическая. – 2022. – Т. 86, № 4. – С. 516-526.

DOI: [10.31857/S0367676522040202](https://doi.org/10.31857/S0367676522040202)

2. *Badilescu, S.* Gold Nano-Island Platforms for Localized Surface Plasmon Resonance Sensing: A Short Review / S. Badilescu, D. Raju, S. Bathini and M. Packirisamy // *Molecules*. – 2020. – V. 25. – P. 4661.

DOI: [10.3390/molecules25204661](https://doi.org/10.3390/molecules25204661)

3. *Abel, B.* Immobilization of enzymes to silver island films for enhanced enzymatic activity / B. Abel, K. Aslan // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 2014. – V. 415. – P. 133–142. DOI: [10.1016/j.jcis.2013.10.026](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2013.10.026)

4. *Pornsuwancharoen, N.* In-situ 3D micro-sensor model using embedded plasmonic island for biosensors / N. Pornsuwancharoen, P. Youplao, M.S. Aziz, et.al // *Microsystem Technologies*. – 2018. – V. 24(15). DOI: [10.1007/s00542-018-3798-1](https://doi.org/10.1007/s00542-018-3798-1)

5. *Hosoki, A.* Localized surface plasmon sensor based on gold island films using a hetero-core structured optical fiber / A. Hosoki, M. Nishiyama, K. Watanabe // *Applied Optics*. – 2018. – V. 56, No. 23. – P. 6673-6679.

DOI: [10.1364/AO.56.006673](https://doi.org/10.1364/AO.56.006673)

6. *Albella, P.* Shape matters: plasmonic nanoparticle shape enhances interaction with dielectric substrate / P. Albella, B. Garcia-Cueto, F. González, et.al // *Nano Lett*. – 2011. – V.11. – P.3531-3537. DOI: [10.1021/nl201783v](https://doi.org/10.1021/nl201783v)

7. *Журихина В.В.* Оптические наноматериалы и структуры на основе ионнообменных стекол / В.В. Журихина // Диссер. д-р. физ. - мат. наук. С-Петербург. – 2015.

8. *Kettunen, H.* Polarizability of a dielectric hemisphere / H. Kettunen, H. Wallen, A. Sihvola // *J. Appl. Phys*. – 2007. – V. 102. – P. 044105. DOI: [10.1063/1.2769288](https://doi.org/10.1063/1.2769288)

9. *Kettunen, H.* Electrostatic resonances of a negative-permittivity hemisphere / H. Kettunen, H. Wallen, A. Sihvola // *J. Appl. Phys*. – 2008. – V. 103. – P. 094112. DOI: [10.1063/1.2917402](https://doi.org/10.1063/1.2917402)

10. *Scherbak, S.A.* Electric Properties of Hemispherical Metal Nanoparticles: Influence of the Dielectric Cover and Substrate / S.A. Scherbak, O.V. Shustova, V.V.

Zhurikhina, A.A. Lipovskii // Plasmonics. – 2015. – V. 10. – P. 519-527 DOI: [10.1007/s11468-014-9836-7](https://doi.org/10.1007/s11468-014-9836-7)

11. *Климов, В.В.* Спонтанное излучение атома в присутствии нанотел / В.В. Климов, М. Дюклуа, В.С. Летохов // Квантовая электроника. – 2001. –Т. 31, № 7. – С. 569-586.

12. *Климов, В.В.* Наноплазмоника : монография / В.В. Климов. – М: Физматлит, – 2009. – 480 с.

ПОВЫШЕНИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ И ИНТЕРЕСА К ОБУЧЕНИЮ СТУДЕНТОВ ПЕРВЫХ КУРСОВ НА ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЯХ ПО ФИЗИКЕ

Якупов Г. С., Цветкова Е. В.

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

Лабораторные работы по физике – неотъемлемая часть образовательного процесса на естественно-научных и технических направлениях. Однако для студентов-первокурсников они нередко становятся серьезным испытанием. Рассмотрим ключевые проблемы, с которыми сталкиваются студенты и возможные пути их решения.

К основным трудностям при выполнении лабораторных работ по физике можно отнести недостаточную подготовку многих студентов по школьному курсу физики. Большая часть студентов поступают в вуз со значительными пробелами в базовых знаниях: плохое владение физическими законами и математическими выражениями, их описывающими. Это в свою очередь мешает корректно интерпретировать условие задачи, выбирать нужные математические выражения, анализировать полученные результаты.

Еще одной немаловажной проблемой является нехватка навыков работы с лабораторным оборудованием, поскольку в школьном курсе физики лабораторные работы зачастую проводят упрощенно или демонстрационно. На первом курсе студенты знакомятся с новыми, неизвестными им приборами, кроме того в некоторых лабораторных работах возникает необходимость самостоятельно собирать схемы, настраивать их и корректно снимать показания приборов.

Сложности возникают также при обработке полученных результатов, в частности построение графика по экспериментальным данным, оценивание погрешностей, применение методов статистической обработки результатов. У большого числа студентов нет таких навыков, кроме того, часто студенты игнорируют использование программного обеспечения для оптимизации обработки полученных результатов, например, Excel, Origin.

Еще одной существенной трудностью является непонимание структуры отчета по лабораторной работе. Студенты не всегда знают, как правильно оформить цель работы, теоретическое обоснование, таблицы с результатами, анализ расхождения теории и эксперимента. В результате отчет по лабораторной работе получается хаотичным или излишне кратким.

Для иностранных студентов еще одной проблемой является языковой барьер, поскольку в курсе физики содержится большое количество специфических терминов (интерференция, дифракция, электромагнитная индукция) и англоязычные обозначения некоторых измерительных приборов (А

– амперметр, V–вольтметр, mA, mV – миллиамперметр, милливольтметр) затрудняют восприятие методических указаний к лабораторным работам.

Большинству студентов не хватает времени, отведенного на выполнение лабораторной работы, в больших по численности группах не всегда удается получить доступ к нужной лабораторной установке, поскольку на ней уже выполняют работу другие студенты. Также необходимо учитывать ситуации аппаратных сбоев работы оборудования, которые могут привести к потере ранее полученных данных.

Определенную роль играет и психологический фактор: страх ошибиться, неуверенность в своих силах, боязнь вопросов преподавателя снижают концентрацию и мотивацию студентов.

В данной статье авторы сделали попытку поиска путей решения этих проблем. Одним из путей решения данного перечня проблем является проведение вводных семинаров по базовым законам физики. Так, например, с 2025 года на кафедре физики и методики преподавания физики Оренбургского государственного университета была введена учебная дисциплина «Практикум по решению физических задач», одной из целей которой является устранение пробелов в знаниях по физике и у студентов первых курсов технических специальностей. Для выработки навыков работы с лабораторным оборудованием можно организовывать тренировочные занятия, цель которых познакомить студентов с новым для них экспериментальным оборудованием и сформировать у них навыки работы с ним.

Еще одним немаловажным аспектом является разработка методических пособий (рекомендаций) с четким алгоритмом действий, примерами заполнения таблиц, образцами графиков и расчетов погрешностей.

Перед работой необходимо продемонстрировать оборудование: как включаются и настраиваются приборы, объяснить типичные ошибки, допускаемые при снятии показаний с приборов.

Также можно предоставить готовые шаблоны (структуры) с пояснениями, например:

1. Цель:....
2. Теория: формулы (1) – (3), определения терминов.
3. Схема установки: рисунок с подписями.
4. Результаты: таблица 1, график 1.
5. Расчеты: примеры вычислений погрешностей.
6. Вывод: сравнение с теорией, источник ошибок.

Большое значение для успешного выполнения лабораторной работы играет групповая работа студентов. Работы выполняются в парах (в больших группах по три человека) для того, чтобы студенты могли: обсуждать ход эксперимента, распределять между собой обязанности (один снимает показания с приборов, другой записывает), помогать друг другу в расчетах.

Необходимо также наличие обратной связи: разбор типичных ошибок на следующих занятиях, комментарии к первым отчетам до выставления оценки, проведение коротких устных опросов для проверки понимания.

Также желательно показать студентам, что для упрощения процедуры расчетов и построения графиков желательно использовать соответствующее программное обеспечение.

В заключении хотелось бы отметить что трудности, возникающие у студентов первого курса при выполнении лабораторных работ – это естественный этап адаптации в вузе. Системный подход, включающий методическую поддержку, четкие инструкции и психологический комфорт, позволяет снизить стресс и повысить качество усвоения материала. Важно, чтобы преподаватели не только контролировали результат, но и помогали студентам освоить «язык» экспериментальной физики – от работы с приборами до анализа полученных данных.

Список литературы

1. Ученые записки физического факультета московского университета. «Развитие и совершенствование методик физических лабораторных практикумов от второй половины XIX века до настоящего времени», И. В. Кузнецова, МГУ, 2019 г.

2. Тарасов О. М. Лабораторные работы по физике с вопросами и заданиями. М: Форум-Инфра, 2011.